

# GACETA

*digital*  
del Instituto de Química UNAM



Gaceta IQ-UNAM  
Año 8, Número 18

Órgano informativo del Instituto de Química de la UNAM

Enero-junio de 2022



Ceremonia del Día del Maestro 2022



Dr. Enrique Graue Wiechers  
Rector

Dr. Leonardo Lomelí Vanegas  
Secretario General

Dr. Luis Agustín Álvarez-Icaza Longoria  
Secretario Administrativo

Dr. William Henry Lee Alardín  
Coordinador de la Investigación Científica

Dr. Luis Demetrio Miranda Gutiérrez  
Director del Instituto de Química

Año 8, Número 18  
Enero-junio, 2022



## Coordinación Editorial Científica

Dr. Braulio V. Rodríguez Molina

## Coordinación de Redacción

Lic. Katy Angelica Fonseca Salcedo

## Coordinación Editorial de Diseño

M. en Comunicación y Educación Hortensia Segura Silva

## Comité Editorial 2021-2022

Dr. Luis Demetrio Miranda Gutiérrez, Dr. Braulio V. Rodríguez Molina, M. en C. Marcela Castillo Figa, M. en C. Ed. Hortensia Segura Silva, Lic. Katy Fonseca Salcedo, Dr. Daniel Finkelstein Shapiro, Dra. Danaí Sorrosa Montalván, Dra. Carmen Ortiz Cervantes, Dr. José Rivera Chávez, Dr. Rubén Omar Torres Ochoa, Dra. Ana Luisa Silva Portillo, M. en C. Alejandra Núñez Pineda, Dra. Paula Ximena García Reynaldos, Lic. Raquel Feregrino Curiel, Andrea Irlanda Martínez Rosete, Joselín Desiré Pagaza Nava, Hilarie C. Chavez Montes de Oca, Mauricio Lara Mendoza, Cynthia Paola Ramírez Saucedo, Jafte Martínez Cañares y Aleyda Lemus Hernández.

## Fotografías:

Hortensia Segura Silva, Mauricio Lara Mendoza, Raúl Tafolla Rodríguez y Claudine Chamoreau y DGCS-UNAM.

Publicación realizada por la Secretaría Académica con el apoyo del área de Comunicación y Divulgación y de la Biblioteca.

GACETA DIGITAL DEL INSTITUTO DE QUÍMICA UNAM, Año 8, No. 18, enero-julio de 2022, es una publicación semestral editada por la Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad Universitaria, Alcaldía Coyoacán, C.P. 04510, Ciudad de México; a través del Instituto de Química, Circuito Exterior s/n, Ciudad Universitaria, Col. Copilco, Alcaldía Coyoacán, C.P. 04510, Ciudad de México, tel. 55 56 16 25 76, <http://www.iqumica.unam.mx/gacetadigital>, [gacetaiq@iqumica.unam.mx](mailto:gacetaiq@iqumica.unam.mx). Editores responsables: Dr. Fernando Cortés Guzmán y Mtra. Hortensia Segura Silva. Reserva de Derechos al Uso Exclusivo No. 04-2014-110718351600-203, otorgado por el Instituto Nacional del Derecho de Autor. Responsables de la última actualización de este número, Instituto de Química, Dr. Fernando Cortés Guzmán y Mtra. Hortensia Segura Silva, Circuito Exterior s/n, Ciudad Universitaria, Col. Copilco, Alcaldía Coyoacán, C.P. 04510, Ciudad de México, Tel. 55 56 16 25 76, fecha de la última modificación, 20 de enero de 2022.

Las opiniones expresadas por los autores no necesariamente reflejan la postura del editor de la publicación. Se autoriza la reproducción total o parcial de los textos aquí publicados siempre y cuando se cite la fuente completa y la dirección electrónica de la publicación.

# GACETA DIGITAL IQ

## CONTENIDO

EDITORIAL.....	5
ARTÍCULOS PUBLICADOS.....	6
ARTÍCULO DESTACADO DE INVESTIGACIÓN.....	13
NUEVAS CONTRATACIONES.....	15
EL CENTRO CONJUNTO DE INVESTIGACIÓN EN QUÍMICA SUSTENTABLE UAEM-UNAM (CCIQS): RESILIENCIA Y PRODUCTIVIDAD EN TIEMPOS DE PANDEMIA.....	16
CEREMONIA DEL DÍA DEL MAESTRO 2022.....	17
MOLÉCULAS QUE RECONOCEN Y DETECTAN HEMOGLOBINA GLICADA: UN INDICADOR QUÍMICO DE LA <i>DIABETES MELLITUS</i> .....	19
ESPECTROSCOPÍA MULTIDIMENSIONAL: LA FRONTERA DE LO SUTIL.....	22
10 AÑOS DE LAS ESTANCIAS CORTAS DE INVESTIGACIÓN EN EL INSTITUTO DE QUÍMICA.....	25
INFORME DE ACTIVIDADES 2018-2022 INSTITUTO DE QUÍMICA DE LA UNAM.....	28
DESIGNACIÓN DEL DR. LUIS DEMETRIO MIRANDA GUTIÉRREZ COMO DIRECTOR DEL IQ-UNAM (2022-2026).....	30
EL DR. EDMUNDO GUZMÁN PERCÁSTEGUI (CCIQS UAEM-UNAM) OBTUVO EL PREMIO TALENTO EDOMÉX 2021.....	31
NUEVAS ESTRATEGIAS CONTRA VIEJOS ENEMIGOS: LA IMPORTANCIA DE LA QUÍMICA EN EL COMBATE DE LA RESISTENCIA MICROBIANA.....	32
ESTUDIANTES GRADUADOS.....	35

# facebook

# CONTÁCTANOS

[www.iquimica.unam.mx](http://www.iquimica.unam.mx)



@iquimicaunam



RedesIQUNAM



[difusion@iquimica.unam.mx](mailto:difusion@iquimica.unam.mx)



iquimicaunam

# Editorial

## *digital*

Una vez concluidos diecisiete números de la Gaceta Digital del Instituto de Química, es momento de presentar la siguiente edición. En cada una de éstas, se realiza un gran esfuerzo por parte de académicos y estudiantes, para presentarles periódicamente una Gaceta de calidad, en la cual se sientan complacidos con el contenido y resultado final.

Durante los ocho años en los que el Instituto de Química se ha encargado de presentar la Gaceta Digital, la comunidad ha tenido un impresionante desarrollo, ya que ésta se ha creado con el principal objetivo de la vinculación y la difusión de actividades que se realizan en el mismo. Por ejemplo, uno de los importantes acontecimientos que se llevaron a cabo en esta Gaceta 18, es el trabajo que se realizó del primer método en el que se emplea un catalizador de oro para acceder a olefinas tetra-sustituidas, a partir de aril propargil éteres; el cual es posible aplicar en la tecnología de compuestos. De igual manera, se documentó cómo es que las moléculas reconocen y detectan hemoglobina glicada, la cual es un indicador de la *diabetes mellitus*; esta investigación fue dirigida por la maestra Karina Salomón, Iván Bazany y Alejandro Dorazco. Sin duda, es un buen avance para el análisis e investigación de la enfermedad.

En éstas páginas se incluye un artículo que presenta el planteamiento y desarrollo de estrategias para el combate de resistencias antimicrobianas, al ser éste un problema de salud pública, nos compete como población comprenderlo y analizarlo, pues su trascendencia, al desarrollar fármacos novedosos y eficientes, beneficiarán el tratamiento de diversas enfermedades.

Dentro del presente año, se anunció la designación del nuevo director del Instituto de Química, el Dr. Luis Demetrio Miranda Gutiérrez, quien estará al frente

de nuestra apreciable institución durante el periodo 2022–2026. Es un verdadero honor tener a un destacado especialista, investigador y estudioso en la materia, pues además de comprender y apoyar las necesidades en cada área de estudio, es, sin duda, un gran modelo a seguir para los estudiantes.

Podemos mencionar como acontecimiento relevante para nuestro Instituto, la Ceremonia de celebración del 10° Aniversario del Programa de Estancias Cortas de Investigación. Éste programa le ha permitido a los estudiantes de nivel bachillerato, tener un acercamiento más detallado a lo que es trabajar en las actividades, investigaciones y laboratorios especializados; enriqueciendo por generaciones a muchos estudiantes que han pisado el Instituto, pues los ha ayudado a encontrar su vocación y área de estudio.

A pesar de todas las dificultades presentadas en el camino, después de vivir dos años de pandemia y aún seguirnos adaptando a estas nuevas condiciones de trabajo, podemos percatarnos de lo importantes que han sido cada uno de los proyectos e investigaciones, los cuales han permitido el fortalecimiento y dando como resultado grandes contribuciones de nuestro reconocido Instituto de Química lo cuál sin duda, quedará plasmado en la historia, desarrollo e innovación científica; claramente, esto no podría haber sido posible sin el esfuerzo y dedicación tanto de los investigadores, así como de los colaboradores y estudiantes del Instituto; les expresamos nuestro más profundo agradecimiento.

Los invitamos a continuar con la lectura de ésta, su Gaceta Digital, esperando sea de su agrado.

Cynthia Paola Ramírez Saucedo y Aleyda Lemus Hernández,  
**Comité Editorial de la Gaceta Digital**

Aguilar-Peralta, J.S.; Maldonado-López, Y.; Espíritu-Santo, M.M.; **Reyes-Chilpa, R.**; Oyama, K.; Fagundes, M; Ávila-Cabadilla, L.D.; Álvarez-Añorve, M.Y.; Vaca-Sánchez, M.S., Cuevas-Reyes, P. Contrasting successional stages lead to intra- and interspecific differences in leaf functional traits and herbivory levels in a Mexican tropical dry forest. *Eur. J. For. Res.* **2022**, *141*(2), 225-239.

<https://doi.org/10.1007/s10342-021-01434-4>

Amador-Sánchez, Y.A.; López-Mendoza, P.; Mijangos, MV; **Miranda, L.D.**\* Synthesis of tetrahydro-4H-pyrido[1,2-b]isoquinolin-4-ones from Ugi 4-CR-derived dihydroisoquinoline- xanthates. *Eur. J. Org. Chem.* **2022**, e202200080. <https://doi.org/10.1002/ejoc.202200080>

Arango-Camacho, C.; Pavón-Ipiales, K.; **Frontana-Urbe, B.A.**; Palma-Cando, A.\* Recent advances in hole-transporting layers for organic solar cells. *Nanomaterials* **2022**, *12*(3), 443.

<https://doi.org/10.3390/nano12030443>

Aristizabal-Ferreira, VA; Guevara-Vela, JM; Sauza-de la Vega, A; Pendas, AM; Fuentes-Pineda, G; **Rocha-Rinza, T.**\* Computation of photovoltaic and stability properties of hybrid organic-inorganic perovskites via convolutional neural networks. *Theor. Chem. Acc.* **2022**, *141*(4), 19. <https://doi.org/10.1007/s00214-022-02875-9>

Ariza-Roldán A.; López-Cardoso M.; Tlahuext H.; Vargas-Pineda G.; Román-Bravo P.; Acevedo-Quiroz M.; Alvarez-Fitz P.; **Cea-Olivares R.**\* Synthesis, characterization, and biological evaluation of eight new organotin (IV) complexes derived from (1R, 2S) ephedrinedithiocarbamate ligand. *Inorg. Chim. Acta* **2022**, *534*, 120810.

<https://doi.org/10.1016/j.ica.2022.120810>

Auriostigue-Bautista, Juan C.; **Hernández-Vázquez, E.**; Gonzalez-Calderón, D.; Figueroa-Romero, JL; Castillo-Villanueva, A.; Torres-Arroyo, A.; Ponce-Macotela, M.; Rufino-González, Y; Martínez-Gordillo, M.; **Miranda, L.D.**\*; Oria-Hernández, J.\*; Reyes-Vivas, H.\* Discovery of Benzopyrrolizidines as promising anti-giardiasis agents. *Front. Cell. Infect. Microbiol.* **2022**, *11*, 828100.

<https://doi.org/10.3389/fcimb.2021.828100>

Ávila-Barrientos, L.P.; Cofas-Vargas, L.F.; Agüero-Chapin, G.; Hernández-García, E.; Ruiz-Carmona, S.; Valdez-Cruz N.A.; Trujillo-Roldán M.; Weber J.; Ruiz-Blanco, Yasser B., Barril, X.; **García-Hernández, E.**\* Computational design of Inhibitors targeting the catalytic  $\beta$  subunit of Escherichia coli FO F1-ATP synthase. *Antibiotics* **2022**, *11*(5), 557.

<https://doi.org/10.3390/antibiotics11050557>

Barrera, Y.; **Anderson, J.S.M.**\* Predicting the reactivity of unsaturated molecules to methyl radical addition using a radical two-parameter general-purpose reactivity indicator. *Chem Phys. Lett.* **2022**, *791*, 139333.

<https://doi.org/10.1016/j.cplett.2021.139333>

Barrientos, L; **Pérez-Castorena, A.L.**; Martínez, M; **Maldonado, E.**\* Sucrose esters from the calyxes of *Physalis chenopodifolia*. *Carbohydr. Res.* **2022**, *512*, 108518.

<https://doi.org/10.1016/j.carres.2022.108518>

Cadena-Cacedo, A.; González-Gutiérrez, M.; Guzmán-Méndez, Ó.; Reza, M.; Durán-Hernández, J.; **Peon, J.**\* Time-resolved fluorescence and anisotropy studies of red pigments present in acrylic formulations. *J. Lumines.* **2022**, *248*, 118913.

<https://doi.org/10.1016/j.jlumin.2022.118913>

Campos-Escamilla, C.; Gonzalez-Rámirez, L.A.; Otálora, F.; Gavira, J.A.; **Moreno A.**\* A short overview on practical techniques for protein crystallization and a new approach using low intensity electromagnetic fields. *Prog. Cryst. Growth Charact. Mater.* **2022**, *68*(1), 100559.

<https://doi.org/10.1016/j.pcrysgrow.2022.100559>

Campos-Escamilla, C.; Siliqi, D.; González-Ramírez, L.A.; López-Sánchez, C; Gavira, J.A.; **Moreno, A.**\* X-Ray characterization of conformational changes of human apo- and holo-transferrin. *Int. J. Mol. Sci.* **2022**, *22*(24), 13392. <https://doi.org/10.3390/ijms222413392>

Carmona-Reyes, G.; Ballinas-Indili, R.; Sánchez-Vergara, M.E.; **Toscano, R.A.**; **Álvarez-Toledano, C.**\* Regiodivergent synthesis of vinyl trifluoromethanesulfonates  $\gamma/\delta$  lactones: Via 1,6 addition/intramolecular one-pot annulation of 1,4-dihydropyridines derived from pyridinyl propenones. *Tetrahedron Lett.* **2022**, *88*, 153591.

<https://doi.org/10.1016/j.tetlet.2021.153591>

Castañeda-Fernandez, C.; Chávez-Santos, R.M.; Silva-Miranda, M.; Espitia-Pinzón, C.; **Martínez, R.**; **Kozina, A.**\* Optimization of rifampicin encapsulation in PLGA polymeric reservoirs. *Int. J. Pharm.* **2022**, *622*, 121844.

<https://doi.org/10.1016/j.ijpharm.2022.121844>

Cedillo-Cruz, A., **Martínez-Otero, D.**, **Barroso-Flores, J.**, Cuevas-Yañez, E.\*  $\alpha$ -(1,2,3-Triazolyl)-acetophenone: Synthesis and theoretical studies of crystal and

2,4-dinitrophenylhydrazine cocrystal structures. *J. Mol. Struct.* **2022**, *1264*, 133225.

<https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2022.133225>

Centeno-Betanzos, L.Y.; López-Caamal, A.; Cortés Rendon, N.; **León-Santiago, M.**; Osorio E.; Bastida Armengol J.; Cano-Santana Z.; **Reyes-Chilpa, R.**; Tovar-Sánchez, E. Microsatellites, morphological, and alkaloids characterization of *Zephyranthes fosteri* and *Z. alba* (Amaryllidaceae): Allopatric populations. *Biochem. Syst. Ecol.* **2022**, *101*, 104398.

<https://doi.org/10.1016/j.bse.2022.104398>

Chávez-Riveros, A.; Ramírez-Trinidad, Á.; **Hernández-Vázquez, E.**; **Miranda, L.D.**\* Expanding the structure-activity relationship of cytotoxic diphenyl macrocycles. *Bioorg. Med. Chem. Lett.* **2022**, *62*, 128628.

<https://doi.org/10.1016/j.bmcl.2022.128628>

Colin-Molina, A.; Arcudia, J.; López-López, E.R.; Jellen, M.J.; García-González, M.C.; Merino, G.; **Rodríguez-Molina, B.**\* Multicomponent crystals with two fast reorienting constituents over perpendicular noncovalent axes. *Cryst. Growth Des.* **2022**, *22*(1), 673-680.

<https://doi.org/10.1021/acs.cgd.1c01194>

Cruz-Rosado, A.; Romero-Hernández, J.E.; Ríos-López, M.; López-Morales, S.; Cedillo, G.; **Ríos-Ruiz, L.M.**; Cetina-Mancilla, E.; Palacios-Alquisira, J.; Zolotukhin, M.G.; Vivaldo-Lima E.\* Molecular weight development in the superacid-catalyzed polyhydroxyalkylation of 1-propylsatin and biphenyl at stoichiometric conditions. *Polymer* **2022**, *243*, 124616.

<https://doi.org/10.1016/j.polymer.2022.124616>

Durán-Hernández, J.; Muñoz-Rugeles, L.; Guzmán-Méndez, Ó.; Reza, M.M.; Cadena-Caicedo, A.; **García-Montalvo, V.**; **Peón, J.**\* Sensitization of Nd<sup>3+</sup> luminescence by simultaneous two-photon excitation through a coordinating polymethinic antenna. *J. Phys. Chem. A* **2022**, *126*, 16, 2498-2510.

<https://doi.org/10.1021/acs.jpca.2c01052>

Espinoza-Montero, P.J.; Alulema-Pullupaxi, P.; **Frontana-Urbe, B.A.**; Barrera-Díaz, C.E.\* Electrochemical production of hydrogen peroxide on Boron-Doped Diamond (BDD) electrode. *Curr. Opin. Solid State Mat. Sci.* **2022**, *26*(3), 100988.

<https://doi.org/10.1016/j.cossms.2022.100988>

**Esturau-Escofet, N.**; Rodríguez de San Miguel, E.; Vela-Amieva, M.; **García-Aguilera, M.E.**; Hernández-Espino, C.C.; Macías-Kauffer, L.; López-Candiana, C.; Naveja, J.J.; Ibarra-González, I.\* A longitudinal <sup>1</sup>H NMR-based metabolic profile analysis of urine from hospitalized premature newborns receiving enteral and parenteral nutrition. *Metabolites* **2022**, *12*(3), 255.

<https://doi.org/10.3390/metabo12030255>

Fernández-Gijón, CA; Olvera-Mancilla, J; **Le Lagadec, R.**; Barba-Behrens, N; Rico-Bautista, H; **Toscano, RA.**; Alexandrova, L. 2-Substituted perimidines: Zwitterionic tautomerism in solid state, substituent effect on their crystal packing and biological activity. *J. Mol. Struct.* **2022**, *1252*, 132056.

<https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2021.132056>

Fuentes-Pantoja, F.J.; **Cordero-Vargas, A.**\* A Unified Strategy for the Synthesis of Natural Products Containing delta-Hydroxy-gamma- Lactones through a Photoredox ATRA Reaction. *Eur. J. Org. Chem.* **2022**, *23*, e202200464.

<https://doi.org/10.1002/ejoc.202200464>

García, AL; Ochoa-Terán, A\*; Tirado-Guizar, A ; Jara-Cortés, J\*; Piña-Luis, G; Santacruz-Ortega, H; Labastida-Galván, V; Ordóñez, M ; **Peón, J.** Experimental and theoretical study of novel aminobenzamide-aminonaphthalimide fluorescent dyads with a FRET mechanism. *RSC Adv.* **2022**, *12*(10), 6192-6204. <https://doi.org/10.1039/d1ra09278b>

García-Álvarez, F., **Martínez-García, M.**\* Click reaction in the synthesis of dendrimer drug-delivery systems. *Curr. Med. Chem.* **2022**, *29*(19), 3445-3470.

<https://doi.org/10.2174/0929867328666211027124724>

García-Álvarez, F.; Rodríguez-Acosta, G.L.; **Gómez-Vidales, V.**; **Hernández-Ortega, S.**; **Martínez-García, M.**\* Synthesis and ESR studies of multiphenyl porphyrins. *Biointerface Res. Appl. Chem.* **2022**, *12*(5), 6211-6224.

<https://doi.org/10.33263/BRIAC125.62116224>

**Gómez-Vidales, V.**; **Castillo, I.**\* Thioether-containing Copper complexes as PHM, DβM, and TβM model systems. *Eur. J. Inorg. Chem.* **2022**, *1*, e202100728.

<https://doi.org/10.1002/ejic.202100728>

González-López, V.; Resendiz-Lara, DA.; Rosas-Sanchez, A.; Ledesma-Olvera, L.G.; Daran, JC; **Barquera-Lozada, J.E.**; **López-Cortés, J.G.**; Ortega-Alfaro, M.C.\* Iodine-promoted

insertion of the oxygen atom from water in eta(4)-vinylketene[Fe(CO)<sub>3</sub>] complexes. *Dalton T.* **2022**, 51(17), 6868-6875.

<https://doi.org/10.1039/d2dt00674j>

González-Trujano, M.E.; Krengel, F.; **Reyes-Chilpa, R.**; Villasana-Salazar, B.; González-Gómez, J.D.; Santos-Valencia, F.; Urbina-Trejo, E.; Martínez, A., Martínez-Vargas, D.\* *Tabernaemontana arborea* and ibogaine induce paroxysmal EEG activity in freely moving mice: Involvement of serotonin 5-HT<sub>1A</sub> receptors. *Neurotoxicology* **2022**, 89, 79-91.

<https://doi.org/10.1016/j.neuro.2022.01.002>

Guevara-Vela, J.M.; Hess, K.; **Rocha-Rinza, T.**; Martín-Pendás, A.; Flores-Álamo, M., Moreno-Alcántar, G. Stronger-together: The cooperativity of aurophilic interactions. *Chem. Commun.* **2022**, 58(9), 1398-1401. <https://doi.org/10.1039/d1cc05241a>

Gupta, NK; Osorio-Toribio, G; Hernández, M; **Guzmán-Percástegui, E.**; Lima, E.; Ibarra, IA\* Sc(III)-Based metal-organic frameworks. *Chem. Commun.* **2022**, 58(26), 4116-4131.

<https://doi.org/10.1039/d1cc05768e>

Guzmán-Gutiérrez, S.L.; Silva-Miranda, M.; Krengel, F.; **Huerta-Salazar, E.**; **León-Santiago, M.**; Díaz-Cantón, J.K.; Espitia Pinzón, C., **Reyes-Chilpa, R.**\* Antimycobacterial activity of alkaloids and extracts from *Tabernaemontana alba* and *Tarborea*. *Planta Med.* **2022**, 88(1), 53-61.

<https://doi.org/10.1055/a-1157-1732>

**Guzmán-Percástegui, E.** Metal-organic cages against toxic chemicals and pollutants. *Chem. Commun.* **2022**, 58(33), 5055-5071.

<https://doi.org/10.1039/d2cc00604a>

Hernández-Jiménez C. C.; **Cea-Olivares R.**; Tlahuext H.; López-Cardoso M.; Román-Bravo P.; Vargas-Pineda D. G.; Cotero-Villegas A. M.; Pérez-Redondo C.; **Barroso-Flores J.**; **Jancik V.**\* Synthesis, spectral characterization, crystal structures, and DFT study of three new La (III) 2-amino-1-cyclopentene-1-carbodithioate complexes. *J. Mol. Struct.* **2022**, 131495.

<https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2021.131495>

Hochberger-Roa F.; García-Ríos P.H.; **López-Cortés J.G.**; Ortega-Alfaro M.C.; Daran J.C.; Gouygou M.; Urrutigoity M. \* Interrupted intramolecular hydroaminomethylation of N-protected-2-vinyl anilines: novel access to 3-substituted

indoles or indoline-2-ols. *Molecules* **2022**, 27, 1074.

<https://doi.org/10.3390/molecules27031074>

Kimura, Y.; Lugo-Fuentes, L.I.; Saito, S.; Jimenez-Halla, J.O.; **Barroso-Flores, J.**; Yamamoto, Y.; Nakamoto, M., Shang, R.\* A boron, nitrogen-containing heterocyclic carbene (BNC) as a redox active ligand: synthesis and characterization of a lithium BNC-aurate complex. *Dalton T.* **2022**, 51(20), pp. 7899-7906.

<https://doi.org/10.1039/d2dt01083f>

Lazcano-Pérez, F.; Bermeo, K.; Castro, H.; Campos, Z.S.; Arenas, I.; Zavala-Moreno A.; Chávez-Villela S.N.; Jiménez I.; **Arreguín-Espinosa R.**; Fierro R.; González-Márquez H.; Garcia, D.E.; Sánchez-Rodríguez, J.\* A sea anemone *Lebrunia neglecta* venom fraction decreases boar sperm cells capacitation: Possible involvement of HVA calcium channels. *Toxins* **2022**, 14(4), 261.

<https://doi.org/10.3390/toxins14040261>

Lazcano-Pérez F.; Rangel-López E.; Robles-Bañuelos B.; Franco-Vásquez A.M.; García-Arredondo A.; Navarro-García J.C.; Zavala-Moreno A.; Gómez-Manzo S.; Santamaría A.; **Arreguín-Espinosa R.**\* Chemical structure of three basic Asp-49 phospholipases A<sub>2</sub> isolated from *Crotalus molossus nigrescens* venom with cytotoxic activity against cancer cells. *Toxicon* **2022**, 210, 25, 31.

<https://doi.org/10.1016/j.toxicon.2022.02.013>

López-Huerta, F.A.; **Delgado, G.**\* Totaianes, a new type of triterpenes (Comments on the article "Antiproliferative activity and energy calculations of a new triterpene isolated from the palm tree *Acrocomia totai*"). *Nat. Prod. Res.* **2022**, 36(2), 601-604.

<https://doi.org/10.1080/14786419.2020.1793151>

López-Huerta, F.A., **Ramírez-Apan, M.T.**; Méndez-Cuesta, C.A.; **Nieto-Camacho, A.**; **Hernández-Ortega, S.**; Almeida-Aguirre, E. K.P.; Cerbón, M.A.; **Delgado, G.** Synthesis, biological evaluation, molecular docking studies and In-silico ADMET evaluation of pyrazines of pentacyclic triterpenes. *Bioorganic Chem.* **2022**, 125, 105924.

<https://doi.org/10.1016/j.bioorg.2022.105924>

**Macías-Rubalcava, M.L.\***; Garrido-Santos, M.Y. Phytotoxic compounds from endophytic fungi. *Appl. Microbiol. Biotechnol.* **2022**, 106(3), 931-950.

<https://doi.org/10.1007/s00253-022-11773-w>

Mancillas-Salas, S; Reynosa-Martinez, A.C.; **Barroso-**

Flores, J.; Lopez-Honorato, E.\* Impact of secondary salts, temperature, and pH on the colloidal stability of graphene oxide in water. *Nanoscale Adv.* **2022**, *4*, 2435-2443. <https://doi.org/10.1039/d2na00070a> Martínez-Flores, S.; Mujica-Martínez, CA; **Polindara-García, LA\*** Palladium-catalyzed C(sp<sup>2</sup>)/sp<sup>3</sup>)-H arylation of aryl glycinamide derivatives using picolinamide as directing group. *Eur. J. Org. Chem.* **2022**, e202101517.

<https://doi.org/10.1002/ejoc.202101517>

Martínez-Rosas V.; Hernández-Ochoa B.; Navarrete-Vázquez G.; Martínez-Conde C.; Gómez-Chávez F.; Morales-Luna L.; González-Valdez A.; **Arreguin-Espinosa R.**; Enríquez-Flores S; de la Cruz V.P.; Aguayo-Ortiz R.; Wong-Baeza C.I.; Baeza-Ramírez, I.; Gómez-Manzo, S.\* Kinetic and molecular Docking studies to determine the effect of inhibitors on the activity and structure of fused G6PD:6PGL protein from *Trichomonas vaginalis*. *Molecules* **2022**, *27*, 1174.

<https://doi.org/10.3390/molecules27041174>

Mejía-González, A.; Jáidar Y.; Zetina S.; Aguilar-Rodríguez P.; Ruvalcaba-Sil J.L.; **Esturau-Escofet N.\*** NMR and other molecular and elemental spectroscopies for the characterization of samples from an outdoor mural painting by Siqueiros. *Spectroc. Acta Pt. A-Molec. Biomolec. Spectr.* **2022**, *2745*, 121073.

<https://doi.org/10.1016/j.saa.2022.121073>

Mendieta-López J.; **Pérez-Flores F.J.**; Castillo-Rosales, E.; Ortiz-Muñoz, E.; Hernández-Anzaldo, S.; Vázquez-Lima, H.; Reyes-Ortega Y.\* A theoretical and experimental study of liquid-liquid equilibrium to refine raw glycerol obtained as a byproduct on the biodiesel production. *Chem. Eng. J. Advances* **2022**(10), 100257.

<https://doi.org/10.1016/j.cej.2022.100257>

Merino-García, M.R.; Soriano-Agueda, LA; Guzman-Hernandez, JD; **Martínez-Otero, D**; Landeros-Rivera, B.; **Cortés-Guzmán, F.**; **Barquera-Lozada, JE**; **Jancik, V.\*** Benzene and Borazine, so different, yet so similar: Insight from experimental charge density analysis. *Inorg. Chem.* **2022**, *61* (18) 6785-6798.

<https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.1c03923>

Narvaez-Celada, D; **Varela, AS\*** CO<sub>2</sub> electrochemical reduction on metal-organic framework catalysts: current status and future directions. *J. Mat. Chem. A* **2022**, *10*(11), 5899-5917.

<https://doi.org/10.1039/d1ta10440c>

Páez-Franco J.C.; Zermeño-Ortega M.R.; de la O-Contreras C.M.; Canseco-González D.; Parra-Unda J.R.; Avila-Sorros A.; **Enríquez R.G.**; Germán-Acacio J.M.; **Morales-Morales D.\*** Relevance of fluorinated ligands to the design of metallodrugs for their potential use in cancer treatment. *Pharmaceutics* **2022**, *14*(2), 402.

<https://doi.org/10.3390/pharmaceutics14020402>

Pedro-Hernández, L.D; **Martínez-García, M.\*** Synthesis of open-resorcinarene dendrimers with L-serine (Ibuprofen) derivatives. *Curr. Org. Chem.* **2022**, *26*(1), 71-80.

<https://doi.org/10.2174/1385272825666211130164548>

Pérez-Pérez, J; **Hernández-Balderas, U**; **Martínez-Otero, D**; **Moya-Cabrera, M.**; **Jancik, V\*** Hetero-bimetallic alkali titanosilicates [MOTi{OSi((OBu)-Bu-t)(3)}(3)](2) (M = Li-Cs) with terminal Ti-O- groups. *Dalton T.* **2022**, *41*(16), 6148-6152.

<https://doi.org/10.1039/d2dt00939k>

Piñón-Zárate G.; Reyes-Riquelme F.; Sánchez-Monroy M.B.; Velasco-Torrez M.; **Martínez-Vázquez M.**; Cárdenas-Monroy C.A.; Hernández-Téllez B.; Jarquín-Yáñez K.; Herrera-Enríquez M.Á.; Castell-Rodríguez A.E.\* Immunomodulatory properties of masticadienonic acid and 3 $\alpha$ -hydroxy masticadienoic acid in dendritic cells. *Molecules* **2022**, *27*, 1451.

<https://doi.org/10.3390/molecules2704145>

**Pizio, O.**; Sokołowski, S. A novel prewetting behavior of water adsorbed on solid surfaces modified with tethered chains resulting from a density functional theory. *J. Mol. Liq.* **2022**, *357*, 119111.

<https://doi.org/10.1016/j.molliq.2022.119111>

**Pizio, O.**; Sokołowski, S. Effects of fluid–solid interaction strength on wetting of graphite-like substrates by water: density functional theory. *Mol. Phys.* **2022**, *120*(6), e2011454.

<https://doi.org/10.1080/00268976.2021.2011454>

Ramírez-Silva, L.\*; Hernández-Alcántara, G.; Guerrero-Mendiola, C.; González-Andrade, M.; **Rodríguez-Romero, A.**; Rodríguez-Hernández, A.; Lugo-Munguía, A.; Gómez-Coronado, P.A.; Rodríguez-Méndez, C.; Vega-Segura, A. The K<sup>+</sup>-dependent and-independent pyruvate kinases acquire the active conformation by different mechanisms. *Int. J. Mol. Sci.* **2022**, *23*(3) 1347.

<https://doi.org/10.3390/ijms23031347>

Restrepo-Acevedo A.; Osorio N.; Giraldo-López L.E.; D'Vries R.F.; Zacchino S.; Abonia R.; **Le Lagadec R.\***; Cuenú-Cabezas F.\* Synthesis and antifungal activity of nitrophenyl-pyrazole substituted Schiff bases. *J. Mol. Struct.* **2022**, *1253*, 132289. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2021.132289>

Restrepo-Pineda, S.; **Sánchez-Puig, N.**; Pérez, N.O.; **García-Hernández, E.**; Valdez-Cruz, N.A.; Trujillo-Roldán, M.A. The pre-induction temperature affects recombinant HuGM-CSF aggregation in thermoinducible *Escherichia coli*. *Appl Microbiol Biotechnol* **2022**, *106*, 2883–2902. <https://doi.org/10.1007/s00253-022-11908-z>

Ríos-Guerra, H.; Penieres-Carrillo, G.; Barrera-Téllez, F.; Martínez-Zaldívar, A.; **Pérez-Flores, J.**; Hipólito-Nájera, A.R.; Luna-Mora, R.A. Household Infrared technology as an energy-efficient approach to achieve C- $\pi$  bond construction reactions. *J. Braz. Chem. Soc.* **2022**, *33*(1), 60-73. <https://doi.org/10.21577/0103-5053.20210124>

Rodríguez-Acosta, GL; Hernández-Montalbán, C.; Vega-Razo, MFS.; Castillo-Rodríguez, IO; **Martinez-Garcia, M.\*** Polymer-dendrimer hybrids as carriers of anticancer agents. *Curr. Drug Targets* **2022**, *23*(4), 373-392. <https://doi.org/10.2174/1389450122666210906121803>

Rodríguez-Molina, M.; Galicia-Badillo, D.; Cetina-Mancilla, E.; **Cárdenas, J.**; Olvera, L.I.; **Toscano, R.A.**; **Rodríguez-Molina, B.\***; Zolotukhin, M.G. 9-Trifluoromethylxanthenediols: Synthesis and Supramolecular Motifs. *ACS Omega* **2022**, *7*(16), 13520 - 13528. <https://doi.org/10.1021/acsomega.1c06635>

Rodríguez-Peña, K.; Gómez-Román, M.P.; **Macías-Rubalcava, M.L.**; Rocha-Zavaleta, L.; Rodríguez-Sanoja, R.; Sánchez, S.\* Bioinformatic comparison of three *Embleya* species and description of steffimycins production by *Embleya* sp. NF3. *Appl. Microbiol. Biotechnol.* **2022**, *106*, 3173–3190. <https://doi.org/10.1007/s00253-022-11915-0>

**Romo-Pérez, A.**; Escandón-Rivera, S.M.; **Miranda, L.D.**; Andrade-Cetto, A.\* Phytochemical study of *Eryngium cymosum* F. Delaroché and the inhibitory capacity of its main compounds on two glucose-producing pathway enzymes. *Plants* **2022**, *11*(7), 992. <https://doi.org/10.3390/plants11070992>

Rosales-Vázquez, L.D.; Valdes-García, J.; Germán-Acacio, J.M.; Páez-Franco, J.C.; **Martínez-Otero, D.**; Vilchis-Néstor, A.R.; **Barroso-Flores, J.**; Sánchez-Mendieta, V.; **Dorazco-González, A.\*** A water-stable luminescent Zn-MOF based on a conjugated  $\pi$ -electron ligand as an efficient sensor for

atorvastatin and its application in pharmaceutical samples. *J. Mater. Chem. C*, **2022**, *10*, 5944-5955. <https://doi.org/10.1039/d2tc00291d>

Sánchez Vergara, M.E; Canseco-Juárez, MJ; Ballinas-Indili, R; Carmona-Reyes, G; Álvarez-Bada, JR; **Álvarez-Toledano, C.\*** Studies on the structure, optical, and electrical properties of doped Manganese (III) phthalocyanine chloride films for optoelectronic device applications. *Coatings* **2022**, *12*(2), 246. <https://doi.org/10.3390/coatings12020246>

Sánchez Vergara, M.E.; Zubillaga-Serrano, R.I.; Hamui, L; Galván-Hidalgo, J.M.; Cosme, I.; **Gómez, E\*** Improved functionality of poly(3,4-ethylenedioxythiophene): poly(styrenesulfonate)/ hepta coordinated organotin complex films via graphene applied to organic solar cell fabrications. *Front. Mater.* **2022**, *9*, 860859. <https://doi.org/10.3389/fmats.2022.860859>

Santiago-Sampedro, G.I.; Aguilar-Granda, A.; Torres-Huerta, A., Flores-Álamo, M.; Maldonado Domínguez, M.\*; **Rodríguez-Molina, B.\***; Iglesias-Arteaga, M.A.\* Self-assembly of an amphiphilic bile acid dimer: A combined experimental and theoretical study of its medium-responsive fluorescence. *J. Org. Chem.* **2022**, *87*(5), 2255-2266. <https://doi.org/10.1021/acs.joc.1c01334>

Sauza de la Vega, A.; Duarte, L.J.; Silva, A.F.; Skelton, J.M.; **Rocha-Rinza, T.**; Popelier, P.L.A.\* Towards an atomistic understanding of polymorphism in molecular solids. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2022**, *24*, 11278-11294. <https://doi.org/10.1039/d2cp00457g>

Segovia-Pérez, R.; Alvarado-Rodríguez, J.G.\*; Andrade-López, N.; **Jancik, V.**; Cruz-Borbolla, J.; Cortés-Llamas, S.A. Synthesis, characterization, and analysis of intermolecular interactions of isostructural diorganotin compounds containing enantiomeric 1,1-dithioligands. *Polyhedron* **2022**, *2017*, 115723. <https://doi.org/10.1016/j.poly.2022.115723>

Sifuentes-Vázquez, L.D.; Martínez-González, E.; **Toscano, R.A.**; **Gaviño, R.**; **Cárdenas, J.**; Rius-Alonso, C.A.; Amador-Bedolla, C.; García de la Mora, G.A.; Ugalde-Saldivar, V. M.\* Experimental and theoretical exploration of aryl substituent effects on the electronic properties of asymmetric 4,7-Di(thiophene-2-yl)-benzo[c][2,1,5]thiadiazole compounds. *Polycycl. Aromat. Compd.* **2022**, *42*(3), 711-726.

<https://doi.org/10.1080/10406638.2020.1749858>

Sosa-Peinado, A.; León-Cruz, E.; Velázquez-López, I.; Matuz-Mares, D.; **Cano-Sánchez, P.**; González-Andrade, M.\* Theoretical-experimental studies of calmodulin-peptide interactions at different calcium equivalents. *J. Biomol. Struct. Dyn.* **2022**, *40*(6), pp. 2689-2700.

<https://doi.org/10.1080/07391102.2020.1841679>

Sotelo-Gil, J.; Cuevas-Yañez, E.; **Frontana-Uribe, B.A.\*** Recent advances on boron doped diamond (BDD) electrode as cathode in organic and inorganic preparative electrotransformations. *Curr. Opin. Electrochem.* **2022**, *34*, 101004.

<https://doi.org/10.1016/j.coelec.2022.101004>

Téllez-López A.; Morales-Luckie R.A.; **Martínez-Otero D.**; Sánchez-Mendieta V.; Escudero R.; Morales F. Two-dimensional Copper coordination polymer assembled with fumarate and 5,5'-dimethyl-2,2'-bipyridine: Synthesis, crystal structure and magnetic properties. *J. Chem. Crystallogr.* **2022**, *52*, 73-80.

<https://doi.org/10.1007/s10870-021-00893-2>

Valdés, H.; Germán-Acacio, J.M.; van Koten, G.; **Morales-Morales, D.** Bimetallic complexes that merge metallocene and pincer-metal building blocks: synthesis, stereochemistry and catalytic reactivity. *Dalton T.* **2022**, *51*(5), 1724-1744.

<https://doi.org/10.1039/d1dt03870b>

Valdes-García J; Viviano-Posadas A.O.; **Rivera-Chávez J.**; **Ramírez-Apan T.**; Martínez-Vargas S.; Aguirre-Hernández E.; Germán-Acacio J.M.; **Morales-Morales D.**; **Dorazco-González, A.\*** Crystal structures and study of interaction mode of bis-benzimidazole-benzene derivatives with DNA. *J. Mol. Struct.* **2022**, *1249*, 131582.

<https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2021.131582>

Van Calsteren, M.-R., **Reyes-Chilpa, R.**, Jankowski, C.K., Gagnon F.; **Hernández-Ortega, S.**; Díaz-Torres, E. Nmr and x-ray studies of apetalic acid isolated from *Calophyllum brasiliense* and of its chiral amides. *Can. J. Chem.* **2022**, *100*(1), 25-34.

<https://doi.org/10.1139/cjc-2021-0163>

**Varela, A.S.** Effect of the reaction environment on the CO<sub>2</sub> electrochemical reduction. *Chem Catalysis* **2022**, *2*(2), 233-235.

<https://doi.org/10.1016/j.cheecat.2022.01.009>

Vargas-Olvera, E.C.; Salas-Sánchez, F.J.; Colín-Molina,

A.; Pérez-Estrada, S.; **Rodríguez-Molina, B.\***; Alejandro, J.\*; Campillo-Alvarado, G.; MacGillivray, L.R.; Höpfl, H.\* Molecular dynamics studies of aromatic guests in three isostructural inclusion compounds with molecular Boron-Nitrogen hosts. *Cryst. Growth Des.* **2022**, *22*(1), 570-584.

<https://doi.org/10.1021/acs.cgd.1c01140>

Vasquez-Matías, J.I., Hernández-Morales, E.A., Colín-Molina, A., Pérez-Estrada, S., **Rodríguez-Molina, B.\*** Synergic properties in crystals: implication of motion at the molecular level. *RSC Nanoscience and Nanotechnology* **2022**, (55), 468-491.

<https://doi.org/10.1039/9781788019613-00468>

Velásquez-Hernández M.J.; López-Cervantes V.B.; Martínez-Ahumada E.; Tu M.; **Hernández-Balderas U.**; **Martínez-Otero D.**; Williams D.R.; Martis V.; Sánchez-González E.; Chang J.-S.; Lee J.S.; Balmaseda J.; Ameloot R.; Ibarra I.A.; **Jancik V.\*** CCIQS-1: A Dynamic Metal-Organic Framework with Selective Guest-Triggered Porosity Switching. *Chem. Mat.* **2022**, *34*(2), 669 – 677.

<https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.1c03388>

Zavala-Ocampo, L.M.; Aguirre-Hernández, E.; López-Camacho, P.Y.; Cárdenas-Vázquez, R.; **Dorazco-González, A.**, Basurto-Islas, G. Acetylcholinesterase inhibition and antioxidant activity properties of *Petiveria alliacea* L. *Journal of Ethnopharmacology* **2022**, *292*, 115239.

<https://doi.org/10.1016/j.jep.2022.115239>

Zhang, X.; Tanguy, N.R.; Chen, H; Zhao, Y.; Gnanasekar, P.; **Le Lagadec, R.**; Yan, N.\* Lignocellulosic nanofibrils as multifunctional component for high-performance packaging applications. *Mater. Today Commun.* **2022**, *31*, 103630.

<https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2022.103630>

---

Información proporcionada por la Secretaría Académica sobre la producción de artículos publicados con arbitraje.

Datos reportados en la base de datos Web of Science durante el periodo.

# PORTADA DE LA REVISTA EURJOC

## Artículo:

Synthesis of Tetrahydro-4H-pyrido[1,2-b]isoquinolin-4-ones from Ugi 4-CR-Derived Dihydroisoquinoline-Xanthates (Eur. J. Org. Chem. 22/2022).

Autores: Dr. Yoarhy A. Amador-Sánchez, Dr. Pedro López-Mendoza, Dr. Marco V. Mijangos, Dr. Luis D. Miranda.

# EurJOC

European Journal of Organic Chemistry

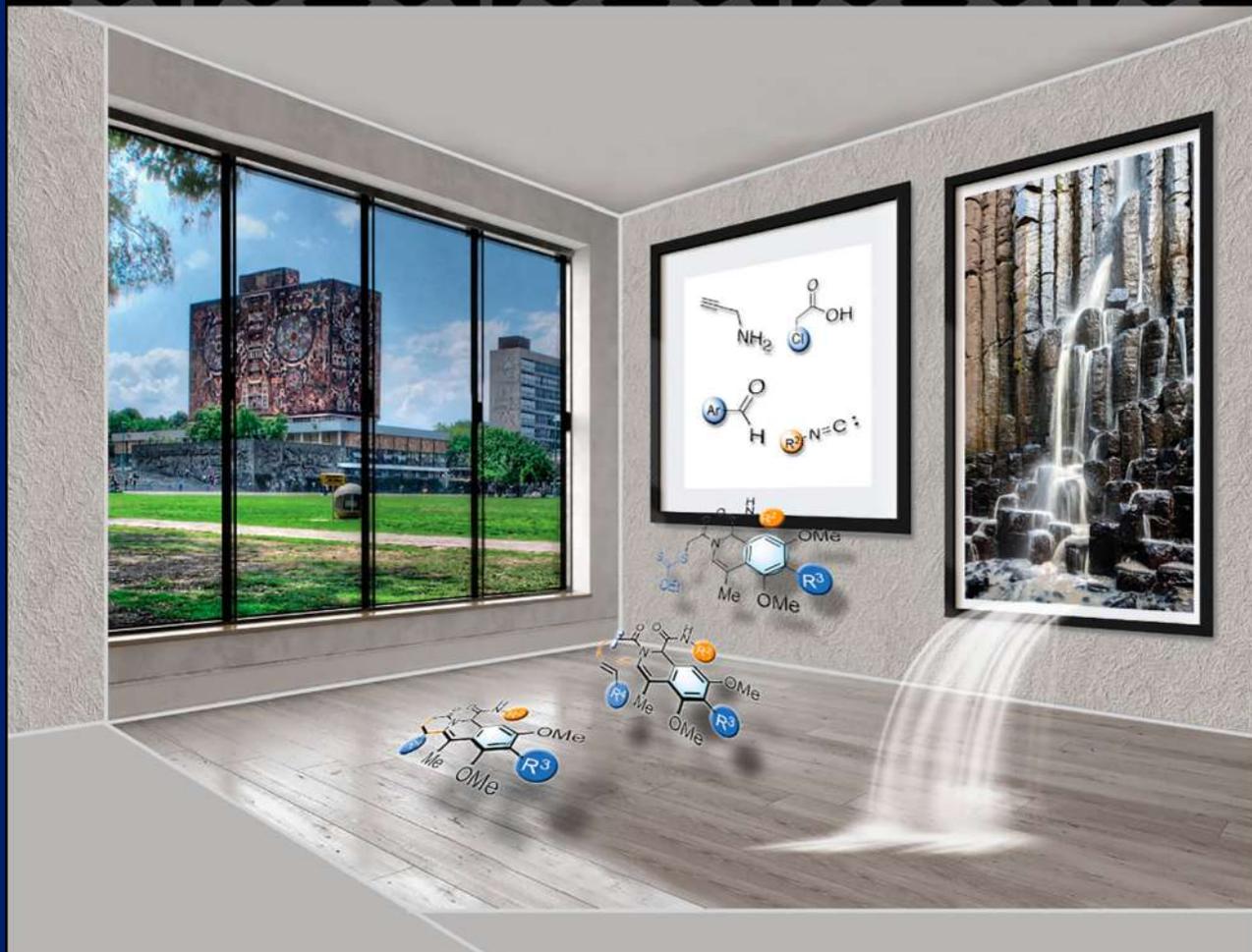
 **Chemistry  
Europe**

European Chemical  
Societies Publishing

### Front Cover:

L. D. Miranda et al.

Synthesis of Tetrahydro-4H-pyrido[1,2-b]isoquinolin-4-ones from Ugi 4-CR-Derived Dihydroisoquinoline-Xanthates



# ARTÍCULO DESTACADO

## Gold-Catalyzed Ascorbic Acid-Induced Arylative Carbocyclization of Alkynes with Aryldiazonium Tetrafluoroborates

Por: Dra. Ana Luisa Silva Portillo y Dr. Omar Torres Ochoa

Autores del artículo: Ignacio Medina-Mercado, Abraham Colin-Molina, José Enrique Barquera-Lozada, Braulio Rodríguez-Molina y Susana Porcel

Los alquenos tetrasustituídos representan una familia de compuestos orgánicos de gran importancia, debido al vasto número de reacciones en las que pueden participar, así como a la amplia gama de aplicaciones biológicas y tecnológicas que poseen. A pesar de esto, su preparación sigue siendo un reto sintético mayor, dado que muchos de los protocolos descritos para este fin exhiben rendimientos bajos y niveles mediocres de regio- y estereoselectividad. Es conocida la posibilidad de acceder a este tipo de olefinas a partir de alquinos, principalmente por medio de un proceso que conlleva la carbometalación del triple enlace. Una alternativa menos explorada consiste en la carbofuncionalización electrofílica del sistema insaturado, de la cual se han documentado ejemplos basados en metales como paladio, cobre, calcio e indio.

Recientemente, el grupo de investigación liderado por la Dra. Susana Porcel, junto con el estudiante de doctorado Ignacio Medina, y en colaboración con otros investigadores del Instituto, publicaron un método sintético novedoso basado en una carbofuncionalización electrofílica mediada por oro, empleando éteres propargílicos y tetrafluoroboratos de arildiazonio, con la finalidad de acceder a olefinas tetrasustituídas que forman parte de un sistema heterocíclico de tipo 2*H*-cromeno 3,4-disustituído (Esquema 1). Dicho protocolo derivó de sus investigaciones previas en las que han dedicado grandes esfuerzos para explotar sintéticamente sales de arildiazonio en reacciones redox promovidas por oro.

El método desarrollado es técnicamente simple y no requiere condiciones drásticas, en tanto que los sustratos

involucrados pueden ser generados fácilmente. Durante el estudio de la reacción observaron que el catalizador  $\text{Ph}_3\text{PAuCl}$  ofrecía los rendimientos más altos y que en presencia de aditivos, como el ácido ascórbico y la 2,6-di-*tert*-butilpiridina, mejoraba la eficiencia de la transformación al permitir el aislamiento de uno de los productos hasta en un 80% de rendimiento. Los autores destacan que este método no requiere del uso de co-catalizadores o de irradiación lumínica para acceder a la especie catalítica de Au(III), responsable de la formación de los dos enlaces C-C.

La aplicabilidad de la metodología fue confirmada al transformar adecuadamente un grupo variado de derivados propargílicos que poseen sustituyentes de distinta naturaleza. La investigación hace hincapié en dos aspectos esenciales para que el proceso tome lugar:

- 1) El fragmento alquinilo debe ser rico en electrones.
- 2) Las sales arildiazonio deben poseer grupos electroattractores.

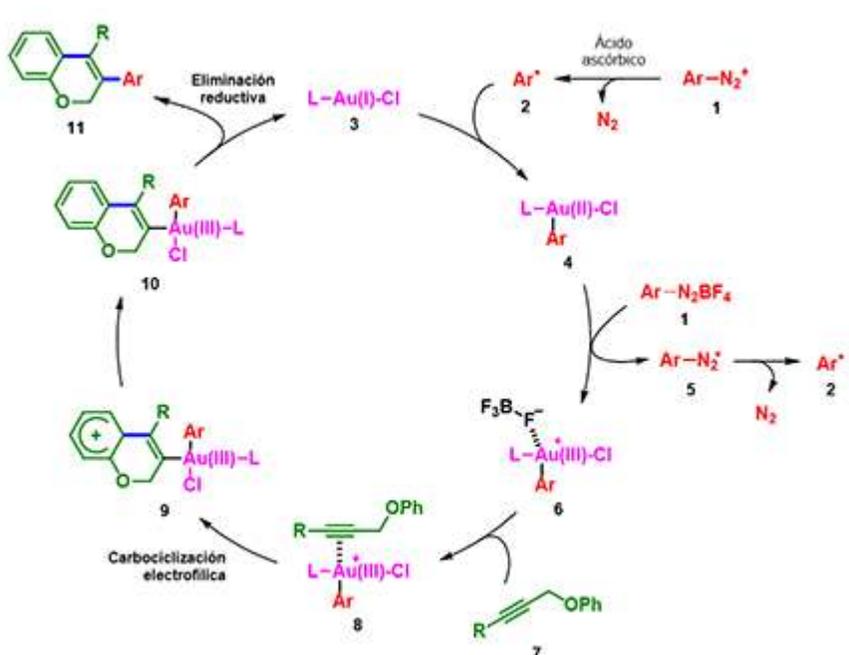
También observaron que la reacción tolera sustituyentes electrodonadores en el residuo del fenol, y que para el caso de electroattractores, si bien la transformación procede, es necesario incrementar el número de equivalentes de la sal de diazonio. Asimismo, es destacable que, junto a la serie de 2*H*-cromenos, fue posible preparar un 2*H*-tiocromeno y una 1,2-dihidroquinolina, aunque con rendimientos inferiores.



Esquema 1. Ácido ascórbico.



El M. en C. Ignacio Medina-Mercado y la Dra. Susana Porcel (Departamento de Química Orgánica).



Esquema 2. Ciclo catalítico propuesto.

El mecanismo planteado con base en cálculos teóricos establece que primero el ácido ascórbico promueve la reducción de la sal de diazonio **1** para generar el radical arilo **2**, dicho radical enseguida se adiciona oxidativamente al complejo de Au(I) **3** conduciendo así a la formación de una nueva especie organometálica de Au(II) **4**. A continuación, el contraion tetrafluoroborato, proveniente de otra molécula de la sal de diazonio **1**, libera densidad electrónica hacia el intermediario de Au(II), lo cual facilita el proceso redox entre dicha especie metálica y el catión arildiazonio **1**. Toda esta secuencia conduce a la formación de un nuevo complejo de Au(III) **6** y al radical arildiazonio **5**, cuya pérdida de nitrógeno regenera el radical arilo **2**. Por su parte, la especie electrofílica de Au(III) **6** se coordina al alquino **7**, lo que favorece la carbociclización electrofílica sobre el carbono más alejado del residuo de fenol. La rearomatización del intermediario resultante **9**, seguida de una eliminación reductiva conduce finalmente a los 2*H*-cromenos **11** y a la regeneración del complejo catalítico de Au(I) **3** (Esquema 1).

Al momento de purificar uno de los productos, los investigadores vieron que se obtenía una mezcla de sólidos de color anaranjado oscuro y amarillo. Posteriormente, comprobaron que se podía acceder a uno u otro de los sólidos de acuerdo con la temperatura a la que se evapora el disolvente (60 °C para el sólido anaranjado oscuro y 10 °C para el sólido amarillo). El análisis de sus datos espectroscópicos demostró que se trataba de la misma molécula y que se encontraba pura, en tanto que los puntos de fusión resultaron distintos, lo cual sugirió polimorfismo cristalino. Esta propiedad pudo ser corroborada por un análisis de rayos X de ambos polimorfos cristalizados, quien infirió que el cambio de color es debido a las distintas conformaciones del cromeno.

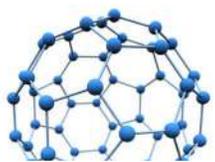
## Comentario personal

El trabajo realizado por los investigadores cobra relevancia al ser el primer método en el que se emplea un catalizador de oro para acceder a olefinas tetrasustituidas a partir de aril propargil éteres, siguiendo un proceso de carbociclización electrofílica. La formación del sistema insaturado completamente sustituido es concomitante con la construcción de 3,4-diaril-2*H*-cromenos, una clase importante de heterociclos. El protocolo demostró ampliamente sus alcances y también evidenció cuáles son las características electrónicas y estéricas que deben poseer los sustratos para ser utilizados en la transformación.

Además, el estudio del mecanismo arrojó luz con respecto al papel que guardan cada uno de los componentes, y sin duda puede fundamentar el desarrollo de nuevas metodologías basadas en el uso de oro y sales de arildiazonio. Por último, las propiedades polimórficas interesantes que exhibió uno de los 2*H*-cromenos preparados, seguramente motivará a que otros grupos de trabajo empleen esta reacción en su camino para determinar la posible aplicación tecnológica de los compuestos.

Cita: *ACS Catal.* **2021**, 11, 8968–8977.

Artículo publicado el año pasado por el Grupo de la Dra. Susana Porcel (investigadora del IQ-UNAM).  
Fotografía: Dr. Rubén Omar Torres Ochoa.



# NUEVAS CONTRATACIONES



**M. en C. José Pablo Montoya Ángel**

Técnico Asociado "C" de Tiempo Completo  
Unidad de Desarrollo Tecnológico del IQ-UNAM  
Fecha de ingreso: 16 de febrero de 2021.

## Resumen Académico

El M. en C. José Pablo Montoya Ángel (nacido en la Ciudad de México), es Químico Farmacéutico Industrial (ENCB-IPN) con grado de maestría en Ciencias Químico-Biológicas (ENCB-IPN), especializado en el área de Química Orgánica (Síntesis), con trayectoria dentro de la Industria Farmoquímica (I+D) en el desarrollo, escalamiento, transferencia tecnológica e ingeniería de nuevos procesos de fabricación de principios activos, haciendo especial énfasis en elementos regulatorios internacionales para la concepción y puesta en marcha de nuevos procesos productivos así como la optimización de procesos de línea y el soporte a planta en sus diferentes aspectos.

Actualmente, funge como responsable de la Unidad de Desarrollo Tecnológico (UDT) del Instituto de Química de la UNAM, en donde brinda asesoría técnica-científica a la industria Química, Farmoquímica y Farmacéutica, dentro del enfoque regulatorio aplicable para la resolución de diferentes problemáticas dentro de sus procesos productivos con perspectiva de riesgos en términos de calidad, optimización y desarrollo de nuevos procesos, entre otros servicios.

## Líneas de investigación

Síntesis y caracterización de impurezas orgánicas.  
Reportes de caracterización.  
Desarrollo y escalamiento de procesos de fabricación.  
Transferencia de Tecnología.  
Gestión de Riesgos de la Calidad.  
Asesoramiento y soporte a la industria Química, Farmoquímica y Farmacéutica.  
Cursos.



**Dra. Erandi Bernabé Pablo**

Investigadora de Tiempo Completo  
Fecha de ingreso: 1° de mayo de 2022.

## Resumen Académico

La Dra. Erandi Bernabé Pablo estudió la licenciatura en Química en la Facultad de Química de la UNAM. Cursó sus estudios de posgrado en Ciencias Químicas en la misma Universidad, graduándose con honores. Realizó estancias de investigación predoctorales en Brno University of Technology-República Checa (síntesis de polímeros) y en el Institut für Anorganische Chemie-Universität Göttingen-Alemania (síntesis inorgánica), así como estancias posdoctorales en el Instituto de Investigaciones en Materiales-UNAM (Laboratorio de Físicoquímica y Reactividad de Superficies: cerámicos alcalinos para captura de CO<sub>2</sub>), en Mississippi State University-USA (química organometálica) y en el Instituto de Química-UNAM (química de los grupos principales). Fue reconocida con la Medalla "Rafael Illescas Frisbie" 2017 por la Sociedad Química de México por su tesis doctoral *Estudio estructural y de reactividad de galoxanos moleculares funcionalizados*, y fue nominada por la Academia Mexicana de Ciencias para asistir al 67° Encuentro de Premios Nobel de Lindau en Alemania. Es Investigadora Nacional Nivel I del SNI desde el año 2020. Ha impartido cursos de diversas áreas de la Química en la Universidad Iberoamericana CDMX y en la Facultad de Química de la UNAM. Es co-fundadora del capítulo CIQMujereSTEAM de la red internacional U.S.-Mexico Leaders Network recibiendo por ello el "Reconocimiento de Liderazgo" como agente de cambio y es mentora del programa Mujeres STEAM. Es autora principal de publicaciones en el área de química cuántica, química de coordinación y materiales cerámicos alcalinos.

## Líneas de investigación

Activación y transformación de moléculas pequeñas de interés ambiental, utilizando compuestos orgánicos e inorgánicos (grupos principales) como catalizadores.

Activación y/o reducción de moléculas pequeñas no reactivas, usando compuestos no metálicos y bajo condiciones suaves.

# El Centro Conjunto de Investigación en Química Sustentable UAEM-UNAM (CCIQS): resiliencia y productividad en tiempos de pandemia

M. en C. Alejandra Núñez Pineda y M. en I. Raúl Tafolla Rodríguez

A lo largo de estos dos años de contingencia sanitaria, el CCIQS ha adquirido experiencia en actividades online que han permitido, por un lado, difundir las capacidades analíticas del Centro, así como el conocimiento y experiencia de los Técnicos Académicos del Instituto de Química que aquí laboran, logrando un acercamiento con la sociedad, la industria y la academia. En este sentido, en lo que va del 2022, se realizaron dos seminarios abiertos al público en general: “*Búsqueda de información en patentes ¿para qué me sirve?*” y “*Fundamentos de Calorimetría de Barrido Diferencial (DSC) y Termogravimetría (TGA)*” que se impartieron el 17 de enero por el M. en I. Raúl Tafolla Rodríguez y el 1° de marzo por la M. en C. Alejandra Núñez Pineda, respectivamente, con asistentes de Universidades, Centros de Investigación, Tecnológicos, empresas y profesionistas independientes, provenientes de diferentes estados de la República Mexicana y de países como Chile, Ecuador y Perú.

Derivado de los seminarios, se impartió el curso de capacitación “*Búsqueda y lectura de documentos de Patente*” por el Mtro. Tafolla, del 25 al 1 de febrero (9 horas), el cual se promovió junto con el curso “*Redacción de patentes*” del Mtro. Guillermo Roura, enriqueciendo la cartera de cursos en el tema de Propiedad Industrial. Adicionalmente, del 22 de marzo al 5 de abril (14 horas), la Mtra. Núñez impartió el curso “*Fundamentos de Calorimetría de Barrido Diferencial (DSC) y Termogravimetría (TGA)*” dirigido a profesionistas del área industrial, docentes, académicos y estudiantes de posgrado.

Por otro lado, el 21 de enero de 2022, la actual Coordinadora del CCIQS, la Dra. Dora A. Solís Casados, presentó en línea el Informe Anual 2021 del Centro, resaltando la productividad en investigación, actividades académicas y de difusión: se publicaron 48 artículos de investigación con un factor de impacto promedio de 4.109, de los cuales, 25 de ellos tuvieron como autor de correspondencia a un investigador del CCIQS. Los tres artículos con mayor factor de impacto fueron del Dr. Vojtech Jancik (*Chemical Science*, 9.825); Dr. Bernardo Frontana (*The Chemical Record*, 6.771); Dra. Fernanda Ballesteros y Dr. Víctor Varela (*Fuel*, 6.609). Con todo ello, se alcanzó un valor promedio de 1.8 artículos/investigadores. Además, algunos investigadores del CCIQS publicaron 5 capítulos de libro en el área de la Química.

A pesar del distanciamiento generado por la pandemia Covid-19, se graduó exitosamente a 16 alumnos de licenciatura, 11 alumnos de maestría y 3 alumnos de doctorado. Asimismo, se consiguió un total de 28 proyectos de investigación con financiamiento DGAPA-UNAM, SlyAE-UAEM, CONACyT y COMECyT. En el área de difusión, hubo participación de 6 investigadores del CCIQS dentro del programa “*Enjambre Universitario*” de Mexiquense TV. Finalmente, el 6 de diciembre de 2021, se realizó el *XII Simposio Interno del CCIQS* vía Zoom, contando con 7 conferencias y 28 carteles.



Información que brinda una curva TGA

Instructora: M. en C. Alejandra Núñez Pineda,

Curso: “*Fundamentos de Calorimetría de Barrido Diferencial (DSC) y Termogravimetría (TGA)*”



Instructor: M. en I. Raúl Tafolla Rodríguez

Curso: “*Búsqueda de información en patentes ¿para qué me sirve?*”



# Ceremonia del Día del Maestro 2022

Joselín Desiré Pegaza, Hilarie Chavéz y Mauricio Lara Mendoza



Recibe su reconocimiento el Dr. Cecilio Álvarez y Toledano.



Entrega de su reconocimiento al Dr. Raúl G. Enríquez Habib.

El pasado 13 de mayo, se llevó a cabo en la sala Miguel Covarrubias la ceremonia de reconocimiento universitario a profesores e investigadores que cumplen 50 años de labor académica, de los cuales podemos destacar a tres académicos que forman parte del Instituto de Química.

El Dr. Cecilio Álvarez y Toledano obtuvo su Licenciatura en Química en la Escuela de Ciencias Químicas de la Universidad Autónoma de Puebla, su maestría en Ciencias en la División de Estudios de Posgrado de la Facultad de Química de la UNAM y los grados de doctor de Tercer Ciclo y de doctor en Ciencias Físicas (Doctorado de Estado), en la Universidad Pierre y Marie Curie en París, Francia. Ha mantenido colaboraciones constantes en particular con las Universidades Pierre y Marie Curie en París (Francia), Paul Sabatier en Toulouse (Francia), Autónoma de Madrid (España), San Carlos de Guatemala. Su campo de investigación se ha enfocado en Química Organometálica y en Química Orgánica, hacia la síntesis de compuestos con posible aplicación Biológica, así como en Química de Materiales.

Dentro de su labor como académico ha publicado más de 200 artículos científicos que han generado más de 2,580 citas. Ha graduado a 21 alumnos de doctorado, 22 de maestría y 58 de licenciatura. Es Investigador Titular "C" del Instituto de Química, Profesor de Asignatura B definitivo en el Departamento de Química Orgánica de la Facultad de Química de la UNAM. Actualmente es Pride "D" permanente e Investigador Emérito del Sistema Nacional de Investigadores, con índice internacional H=26. Ha sido distinguido, entre otros, con la Medalla al Mérito Académico, otorgada por la Asociación de Personal académico de la UNAM; el Premio Nacional a la Investigación Humanística, Científica y Tecnológica, otorgado por la Universidad de San Luis Potosí; el Premio Universidad Nacional en Investigación en Ciencias Exactas de la UNAM y el Premio Nacional de Química

Andrés Manuel del Río en Investigación, otorgado por la Sociedad Química de México.

El Dr. Raúl Guillermo Enriquez Habib, Licenciado y Doctor por la Facultad de Química de la UNAM, posee un posdoctorado en la Universidad de Essex, Inglaterra; colaborador por más de 30 años con la Universidad de Toronto, Canadá. Es Investigador Titular "C", nivel "D" permanente en el PRIDE; Investigador Nacional (SNI) Emérito, con índice internacional H=26.

Fue Secretario Técnico del Instituto de Química; representante del Área de Química en la Academia Mexicana de Ciencias y Secretario de la Sociedad Química de México y jurado para el Premio Nacional de Ciencias. Fue representante de México en la Organización para la Prohibición de Armas Químicas en diversos países. Dedicó su trabajo al estudio estructural Orgánico de Productos Naturales por RMN, transformaciones sintéticas de productos naturales en búsqueda de sustancias bioactivas, el estudio analítico de plantas medicinales de la fitoterapia de México; la aplicación y diseño de métodos de pulsos en RMN para el estudio de estructuras orgánicas y métodos espectroscópicos y analíticos para el estudio de metabolitos secundarios de interés en el campo de la salud. Ha graduado a 27 alumnos de licenciatura, 28 de maestría y 10 de doctorado.

Es profesor del posgrado en Química. Cuenta con 4 patentes y ha sido galardonado con el *Premio Nacional de Química* y como Profesor Honorífico por la Universidad de Arkansas, EU. Ha publicado 137 artículos científicos en el campo de la Química Orgánica. El Dr. Enríquez gestionó la primera Resonancia Magnética Nuclear de imán superconductor para el Instituto de Química (IQ); además, apoyó el desarrollo de la infraestructura de cómputo en los inicios del IQ.



Recibe el Dr. Francisco Yuste López su reconocimiento en la sala Miguel Covarrubias, en el Centro Cultural Universitario de la Universidad Nacional Autónoma de México.

Finalmente, el Dr. Francisco Yuste López, Licenciado, Maestro y Doctor por la Facultad de Química de la UNAM; realizó estancias sabáticas en los Laboratorios Syntex y en el Departamento de Química de la Universidad Autónoma de Madrid. Su actividad en investigación ha originado la publicación de más de 70 artículos de investigación. Desde 1990 ocupa una plaza de investigador de la máxima categoría en la UNAM y su campo de estudio va dirigido en la síntesis orgánica; síntesis de productos naturales, Química orgánica del azufre y síntesis asimétrica, empleando reacciones de cicloadición 1,3-dipolares, Diels-Alder, Pummerer y de adición nucleófila. También ha dirigido 28 tesis, de las cuales 15 son de licenciatura, 8 de maestría y 5 de doctorado. Perteneció al Sistema Nacional de Investigadores desde 1984 donde actualmente es Nivel III y forma parte del Pride D.

Para todos ellos, nuestro reconocimiento y admiración por parte del Instituto de Química por su tenacidad, constancia, son un ejemplo para las nuevas generaciones.



Lugar de la Ceremonia la Sala Miguel Covarrubias en Ciudad Universitaria.

Fotos cortesía: DGCS-UNAM (Benjamín Chaires, Francisco Parra y Víctor Hugo Sánchez).  
Retoque fotográfico: Mauricio Lara Mendoza.

# Moléculas que reconocen y detectan hemoglobina glicada: un indicador químico de la *diabetes mellitus*

M. Karina Salomón, Iván Bazany y Alejandro Dorazco

## ¿Cómo la Química contribuye a la lucha contra la *diabetes mellitus*?

La Química es uno de nuestros mejores aliados en la lucha contra padecimientos globales en los seres vivos, debido al desarrollo constante y creciente de nuevas moléculas funcionales para el tratamiento y detección de enfermedades.

La *diabetes mellitus* tipo 2 es un trastorno metabólico caracterizado por el aumento de los niveles de glucosa en la sangre (hiperglucemia > 120 mg/dL), lo cual genera reacciones bioquímicas no enzimáticas de glicación de proteínas como la hemoglobina (HbA) en los humanos.<sup>[1]</sup> En términos químicos, la hemoglobina glicada (HbA<sub>1c</sub>) se puede definir como el producto de la condensación de la glucosa con el aminoácido N-terminal (L-valina) de la cadena beta de la hemoglobina, de acuerdo a la IUPAC su denominación química general es N-1-desoxifructosil-beta-Hb<sup>[2]</sup>.

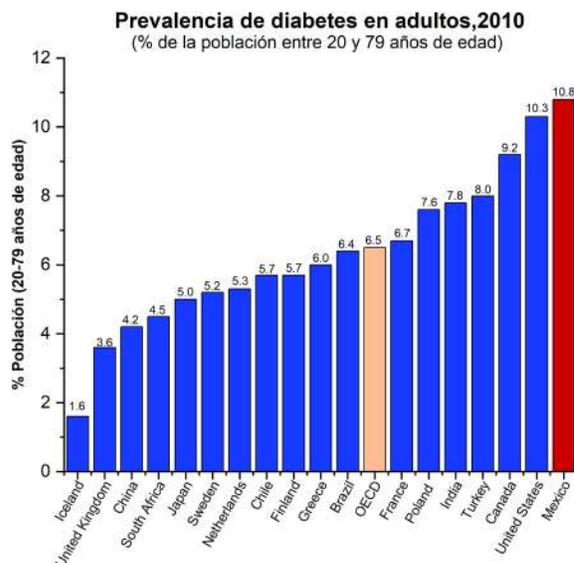
En el proceso de glicación entre la cadena β de la hemoglobina y la glucosa de la sangre se pueden distinguir dos etapas principales (Esquema 1) la primera que consiste en la condensación rápida (~ horas) entre la valina N-terminal y la glucosa para generar una base de Schiff, que es un producto de la reacción de Maillard

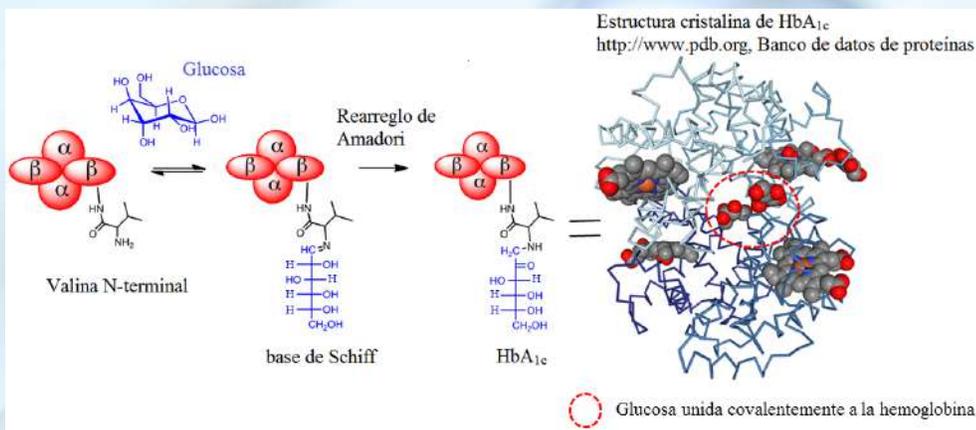
y la segunda, en donde la base de Schiff tiene una reestructuración del doble enlace del tipo Amadori, formándose de manera irreversible un producto de Amadori proteico estable (HbA<sub>1c</sub>)<sup>[3]</sup>. Por otro lado la hemoglobina glicada (HbA<sub>1c</sub>), es uno de los marcadores químicos más importantes para el control y diagnóstico de *diabetes mellitus*, debido a que su concentración en sangre es una biblioteca molecular de los niveles promedio de glucosa en un periodo de tres meses previo al análisis. Por último, es conocido que niveles altos de concentración de HbA<sub>1c</sub>, mayores a 7% de la hemoglobina total, están relacionados con enfermedades cardiovasculares, nefropatías y retinopatías<sup>[5]</sup>.

En 2010, la Asociación Americana de Diabetes recomendó incluir la cuantificación de HbA<sub>1c</sub> como prueba con valor diagnóstico para su detección y tratamiento<sup>[6]</sup>, desde entonces, el desarrollo de receptores artificiales y sensores para HbA<sub>1c</sub> ha atraído la atención de grupos de investigación alrededor del mundo por sus potenciales aplicaciones en la identificación, cuantificación y separación de la HbA<sub>1c</sub><sup>[7]</sup>.

Tabla. 1. Diabetes tipo 2 en países de la Organización para la Cooperación y el Desarrollo Económicos (OECD). Es un organismo de cooperación internacional compuesto por 38 sedes.

<https://www.oecd-ilibrary.org/>





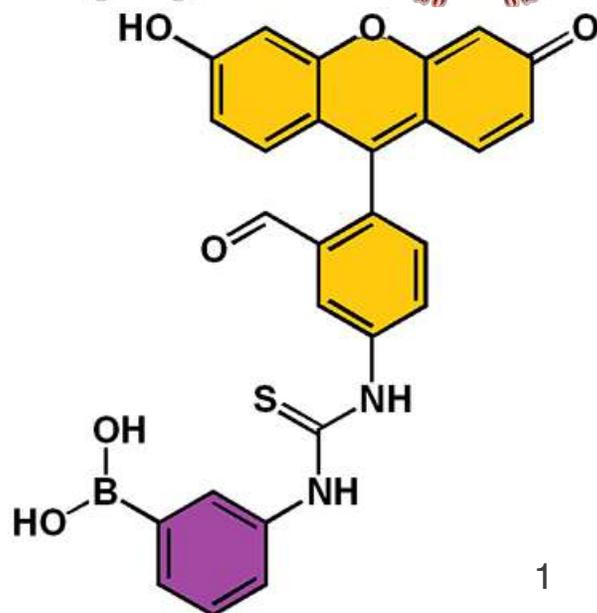
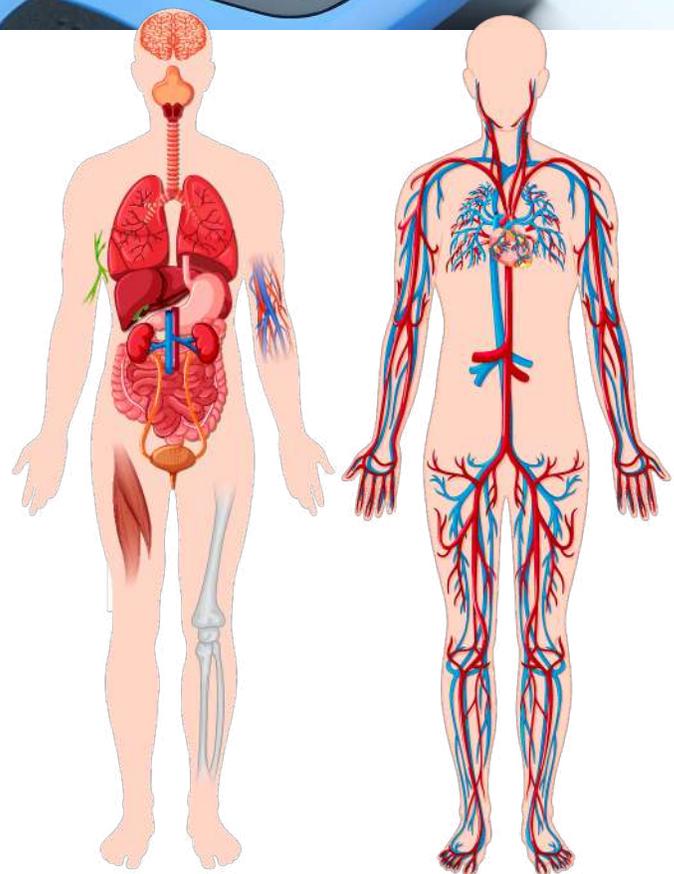
Esquema 1. Formación no enzimática de HbA<sub>1c</sub>.

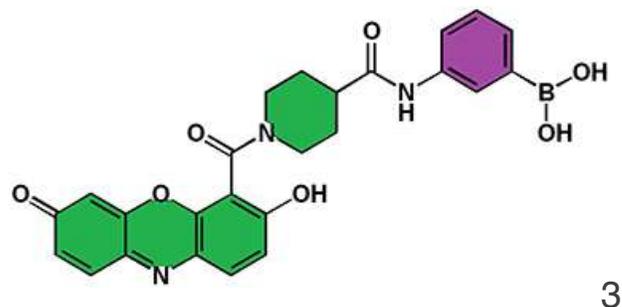
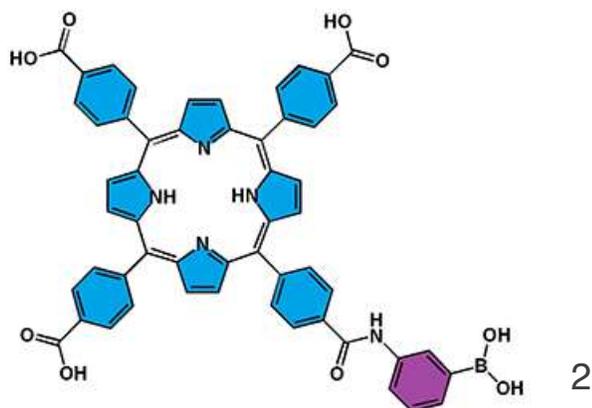
México es un país en vías de desarrollo que tiene problemas graves en temas de salud pública relacionados con la prevalencia de *diabetes mellitus*. De acuerdo a la Encuesta Nacional de Salud y Nutrición 2018, la prevalencia de *diabetes mellitus* tipo 2 entre mexicanos es alrededor del 11%, lo que correspondiente a más de 15 millones de personas. Cabe mencionar que estas cifras van en aumento en forma alarmante tanto en la población adulta como infantil [8] y que México ocupa el primer lugar en prevalencia de diabetes entre los 38 países miembros de la OECD (Tabla 1).

Proyectos científicos que incluyan la generación de conocimiento y sus aplicaciones a corto-mediano plazo, tales como el desarrollo de metodologías analíticas eficientes, de fácil operación y de bajo costo, son de vital importancia para el avance del país.

Hoy en día existen técnicas analíticas sensibles para determinar HbA<sub>1c</sub> tales como inmunoensayos ELISA, sin embargo, éstas presentan como desventajas su origen transnacional y que típicamente usan anticuerpos, los cuales requieren un transporte y almacenamiento a bajas temperaturas.

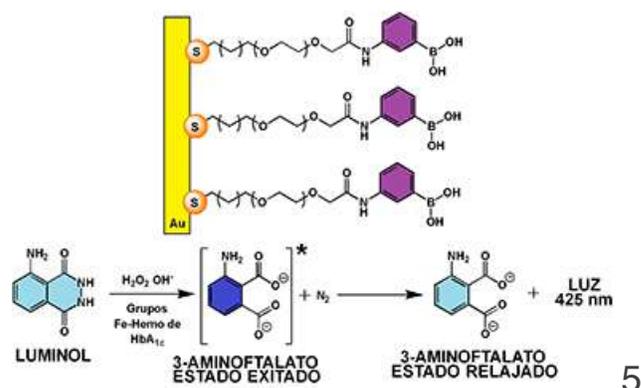
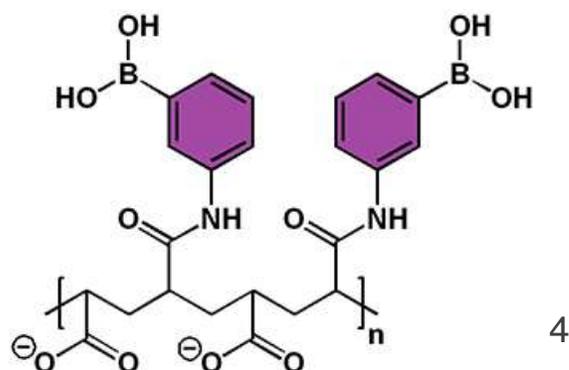
El costo de estos ensayos (~US\$700/96 prueba) y el tratamiento representa un gasto mayor a 8,000 millones de pesos para el sector salud en México y coloca al país en una situación vulnerable a la dependencia de tecnología extranjera. Considerando el grado de prevalencia de diabetes en el país, es relevante e imperante el desarrollo de técnicas analíticas de menor costo y de fácil operación. En este sentido, los quimiosensores luminiscentes selectivos a HbA<sub>1c</sub> diseñados y sintetizados a la "carta" por químicos, son metodologías analíticas eficientes, debido a que su operación requiere equipo de bajo costo y puede llevarse a cabo por personal no experto en química.





La estrategia más eficiente para el desarrollo de quimiosensores de HbA<sub>1c</sub> consiste en tener un cromóforo potente unido covalentemente a un ácido fenilborónico, el cual funciona como sitio de unión a la glucosa de la HbA<sub>1c</sub> a través de una reacción de esterificación entre el sacárido y el ácido fenilborónico.

Los primeros ejemplos fueron reportados por Frantzen quien describió ensamblajes de colorantes con ácido fenilborónico, como los mostrados en las estructuras químicas 1-4, para la determinación de hemoglobina glicosilada en sangre [9]. El análisis está basado en la reacción de esterificación cis-diol entre el ácido borónico del colorante y la hemoglobina glicada, lo que induce un cambio selectivo de las propiedades fotofísicas del ensamblaje. Un ejemplo sobresaliente y reciente que opera bajo una reacción quimioluminiscente es el sistema 5 reportado por Lee, en el cual el residuo de ácido fenilborónico unido a la cadena soportada en filamentos de oro, actúa como el sitio de reconocimiento del HbA<sub>1c</sub>, cuyos grupos Fe-hemo catalizan la reacción con el luminol como unidad fluorescente, en presencia de peróxido de hidrógeno [7c].

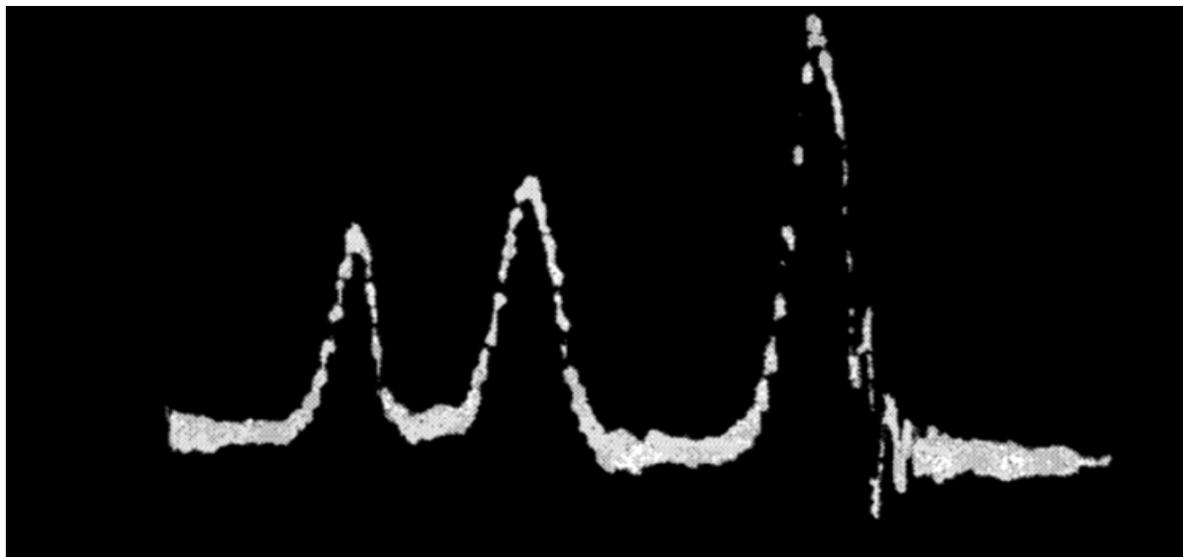


## Referencias:

- [1] A. Heller and B. Feldman, "Electrochemical glucose sensors and their applications in diabetes management," *Chem. Rev.*, (2008) 108, 2482–2505.
- [2] S. Yazdanpanah, M. Rabiee, M. Tahriri, M. Abdolrahim, and L. Tayebi, "Glycated hemoglobin-detection methods based on electrochemical biosensors," *TrAC - Trends Anal. Chem.*, (2015) 72, 53–67.
- [3] M. Thirupathi, J. F. Lee, C. C. Chen, and J. an A. Ho, "A disposable electrochemical sensor designed to estimate glycated hemoglobin (HbA<sub>1c</sub>) level in whole blood," *Sens. Act., B Chem.*, (2021) 329, 129119.
- [4] D. M. Nathan, H. Turgeon, and S. Regan, "Relationship between glycated haemoglobin levels and mean glucose levels over time," *Diabetologia*, (2007) 50, 2239–2244.
- [5] D. M. Nathan, "Diabetes: Advances in diagnosis and treatment," *J. Am. Med. Assoc.*, (2015) 314, 052–1062.
- [6] M. J. Davies, D. A. D. Alessio, J. Fradkin, W. N. Kernan, and C. Mathieu, "Management of hyperglycaemia in type 2 Diabetes, 2018. A consensus report by the American Diabetes Association (ADA) and the European Association for the Study of Diabetes (EASD)," *Diabetologia*, (2018) 61, 2461–2498.
- [7] K. S. Ahn, J. H. Lee, J. M. Park, H. N. Choi, and W. Y. Lee, "Luminol chemiluminescence biosensor for glycated hemoglobin (HbA<sub>1c</sub>) in human blood samples.," *Biosens. Bioelectron.*, (2015) 75, 82–87.
- [8] H. Sun et al., "IDF Diabetes Atlas: Global, regional and country-level diabetes prevalence estimates for 2021 and projections for 2045," *Diabetes Res. Clin. Pract.*, (2022) 183, 109119.
- [9] F. Frantzen, K. Grimsrud, D.-E. Heggli, and E. Sundrehagen, "Soluble highly coloured phenylboronic acids and their use in glycohemoglobin quantification," *Clin. Chim. Acta*, (1997) 263, 207–224.

# Espectroscopía multidimensional: la frontera de lo sutil

Dr. Daniel Finkelstein Shapiro



**Figura 1.** Primer espectro de alta resolución de etanol. Se pueden apreciar las resonancias de los tres protones no equivalentes. Esta medición abre la puerta a la determinación estructural a partir del espectro de RMN (Figura tomada de <sup>[1]</sup>).

La Espectroscopía es el estudio de la interacción entre luz y materia, en particular de lo que podemos aprender de la materia a raíz de esa interacción. El término aplica a una vasta gama de técnicas según se usen ondas tanto de radio, infrarrojas, visibles, rayos X o rayos gamma, para analizar propiedades tan disímiles como lo son los niveles energéticos, la estructura cristalina y las propiedades vibracionales. Con este arsenal hemos entendido la estructura, la función, y la dinámica de los átomos, moléculas y sólidos. La luz rebota, es absorbida, modificada, reemitida y cada uno de los detalles de ésta interacción se ha convertido en una herramienta más de sondeo.

Es natural entonces, que desde el inicio los científicos hayan roto fronteras en términos superlativos: láseres más energéticos, longitudes de onda más cortas, detectores más sensibles y pulsos de luz más cortos. Esto ha permitido profundizar nuestra visión de sistemas moleculares y biológicos, revelando algunos procesos iniciales de la fotosíntesis, afinando la estructura de proteínas y membranas, además de sugerir sitios activos de las enzimas.

En paralelo, y en cierta manera un poco menos vistosa por su sutileza, se ha dado la ruptura de una frontera

de igual importancia: la selectividad; es decir, la discriminación de las señales no deseadas en favor de aquella que responderá la pregunta que estamos investigando, el establecimiento de correlaciones para determinar estructura o función. Uno de los ejemplos más sobresalientes por su utilidad es el de la Espectroscopía de Resonancia Magnética Nuclear (RMN). En las secuencias más utilizadas como NOESY, COSY o HSQC obtenemos una señal que se ha filtrado y desenrollado en una segunda dimensión y que permite asignar una relación de proximidad entre dos espines.

La Espectroscopía RMN mide la frecuencia de precesión de los espines (pequeños imanes presentes en los núcleos) en presencia de un campo magnético. Las primeras mediciones datan de finales de los años 40 y el Premio Nobel le sigue al descubrimiento con un desfase remarkablemente corto, tan sólo unos años. En 1951, se publica un trabajo seminal: el primer espectro de alta resolución de etanol, en donde se demuestra la posibilidad de medir la estructura molecular (Figura 1) <sup>[1]</sup>. Lo que inicialmente aparece como una desventaja para los físicos – que la precesión de los espines dependa del medio ambiente molecular – es visto como una ventaja para los químicos.

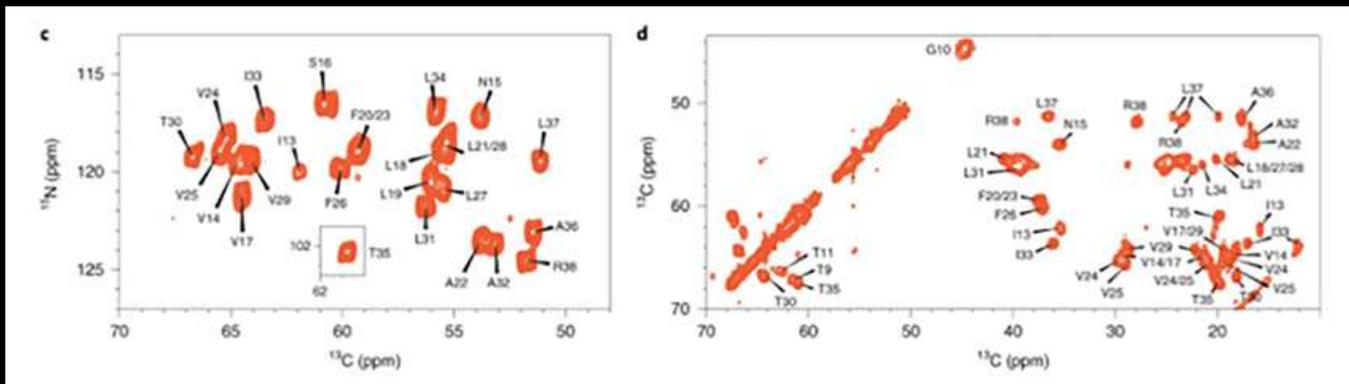


Ya no solamente se puede detectar la presencia de un núcleo, sino también la posición de este dentro de una molécula, siempre y cuando se cumpla el requisito de que los campos magnéticos sean homogéneos y de alta intensidad. Una carrera se instaura para construir imanes cada vez más grandes y más homogéneos, empezando por imanes de 30 MHz. Hoy en día, la carrera no se ha detenido, los imanes son de 1.2 GHz (un millón de veces más intensos que el campo magnético de la tierra), ¡con una homogeneidad de una parte por trillón!

Las muestras se vuelven cada vez más desafiantes, más complejas. Ya no son moléculas pequeñas lo que conlleva un espectro congestionado y muy difícil de analizar. El ingrediente final para hacer leíbles los espectros se da en la década de los 70 's por Jean Jeener: la espectroscopía bidimensional en donde no solamente se mide la frecuencia de los espines, se establecen las correlaciones y la conectividad entre los espines. Actualmente existen cientos de secuencias de RMN que resaltan una u otra correlación entre distintos espines (Figura 2) [2].

A lo mejor es más sencillo imaginar un cuarto lleno de animales emitiendo sonidos mientras tenemos los ojos vendados.

El primer paso en la Espectroscopía de RMN consistió en darse cuenta de que los animales emiten ruido y que lo podíamos medir con las orejas, pero en ese entonces todos sonaban igual y solamente se podía detectar ruido en general. La construcción de mejores imanes, más fuertes y de mayor resolución, permitió distinguir que cada tipo de animal tiene un sonido diferente: el gallo cacarea, el perro ladra y el lobo aúlla. Sin embargo, a la hora de querer analizar una jungla estábamos perdidos, ya que se escuchaban muchos sonidos diferentes sin saber su significado. El siguiente paso consistió en abrir los ojos, empezando a relacionar que cuando escuchamos un aullido, el lobo abre la boca y que el sonido de los pájaros viene en la dirección de lo que identificamos visualmente como pájaros. Y así, poco a poco, se puede reconstruir una selva y, eventualmente, entender la relación entre el sonido y el animal al que pertenece. El concepto de Espectroscopía Multidimensional se deriva hacia el resto del espectro electromagnético. El 2D de ondas infrarrojas y visibles ocurre en la primera década de los años 2000. Mediante trucos ingeniosos en el formado y moldeado de pulsos, se logran obtener algunas correlaciones similares al RMN, con la diferencia fundamental de que los procesos, operando en las energías que corresponden al visible o al infrarrojo, son notablemente más complejos.



**Figura 2.** Espectros bidimensionales  $^{15}\text{N}$ - $^{13}\text{C}$  y  $^{13}\text{C}$ - $^{13}\text{C}$  de la proteína SARS-Cov-2 tomados a 900 MHz. La descongestión del espectro al utilizar una segunda dimensión permite establecer correlaciones de conectividad entre los espines nucleares, lo que a su vez permite establecer la estructura con una resolución de 2.1 Å (Figura tomada de [2]).

Estas técnicas han mejorado nuestra comprensión del flujo de energía en sistemas fotosintéticos. El camino no es fácil y está plagado de falsas señales y artefactos. No es, sino 10 años después, por medio de un arduo esfuerzo teórico, unos experimentos más sofisticados y un filtrado de señales más drástico, que las firmas espectroscópicas cobran sentido: las cascadas energéticas en sistemas fotosintéticos son mapeadas con detalle [4]. En particular, se logra determinar el rol del acoplamiento vibrónico en la transferencia de energía; es decir, la sinergia que tiene el movimiento nuclear de las moléculas para asistir el transporte energético de un lado al otro de los pigmentos fotosintéticos.

En la actualidad estamos empezando a ver los inicios de la Espectroscopía Multidimensional con rayos X.

Conviene notar uno de los aspectos más asombrosos de estas técnicas, ya sea usando radiofrecuencias, rayos infrarrojos, visibles o rayos X; para llegar a obtener la señal deseada tenemos que tirar la mayor parte de lo que medimos. No estamos lidiando con señales pequeñas, debido a que la luz haya tenido que viajar millones de años luz desde una estrella

lejana y tenue, sino que estamos concentrados en una pequeña porción que guarda las correlaciones que queremos, y tirando el resto por medio de diversos filtros. Las ideas, hipótesis y pensamientos sobre un sistema vienen a estrellarse sobre el muro de realidad de una señal, que a veces no es sino una milésima de lo que llega al espectrómetro; pero es esa señal la que contiene firmas sin ambigüedades de lo que realmente está pasando.

Actualmente la multidimensionalidad en experimentos con luz se propaga aceleradamente, con demostraciones en experimentos de fluorescencia, fotocorriente, fotoionización, fotofragmentación. Ya no bastan dos dimensiones sino que se plantean espectroscopías en hasta 6 dimensiones, propiciadas por los avances en moldeado de pulsos. Con este arsenal de herramientas, volteamos la mirada a los mismos problemas en los que trabajaron nuestros predecesores hace medio siglo. Usamos máquinas más grandes para enfocarnos en señales más pequeñas, y no decir “¡Esto nunca lo habíamos observado!”, sino “¡Esto siempre se había observado! Solamente que no habíamos desentrañado su significado.

### Referencias:

- [1] Arnold, J.T., Dharmatti, S.S. and Packard, M.E., *J. Chem. Phys.* 19, 507 (1951).
- [3] Mandala, V.S., McKay, M.J., Alexander A. Shcherbakov, A.A., Aurelio J. Dregni, A.J. Antonios Kolocouris A. and Hong, H. *Nat. Struct. Mol. Biol.* 27, 1202 (2020).
- [4] Thyryhaug, E., Tempelaar, R., Alcocer, M.J.P. et al. *Nature Chem* 10, 780 (2018).

# 10 años de las Estancias Cortas de investigación en el Instituto de Química

Secretaría de Vinculación: Alma Lidia Cortés Montes, Agustín Issac Téllez Zarate, M. en C. Guillermo Roura Pérez, Dra. Marisol Reyes Lezama y la M. en C. Marcela Castillo Figa.

El pasado 18 de abril del año en curso se llevó a cabo en las instalaciones de la Biblioteca “Jesús Romo Armería” del Instituto de Química, la Ceremonia de celebración del 10° Aniversario del Programa de Estancias Cortas de Investigación; primer evento académico realizado de manera presencial, que permitió volver a saludar a distinguidas y queridas personas que han colaborado durante los 10 años en el programa. Tuvimos el gusto de contar con la presencia del Dr. Leonardo Lomelí Vanegas, Secretario General de la UNAM, el Dr. William Lee Alardín, Coordinador de la Investigación Científica de la UNAM, la bióloga María Dolores Valle Martínez, Directora General de la Escuela Nacional Preparatoria, el Dr. Benjamín Barajas Sánchez, Director General del Colegio de Ciencias y Humanidades, el Dr. Gabriel Eduardo Cuevas González Bravo, ex director del Instituto de Química, la Mtra. Maribel Espinoza Hernández, directores de los planteles de la Escuela Nacional Preparatoria, Colegio de Ciencias y Humanidades, de escuelas incorporadas y la comunidad del Instituto de Química.

La ceremonia dio inicio con las palabras de bienvenida del Dr. Jorge Peón Peralta, Director del Instituto de Química, quien agradeció a todos y cada uno de los presentes su asistencia, recalcando la importancia de la vinculación académica con el bachillerato así como el interés de seguir fortaleciendo este lazo, con el fin de que los alumnos tengan un panorama más amplio de las actividades que se realizan en un laboratorio de investigación, la vida académica y otros aspectos, con el objetivo de ayudar a definir el rumbo de su vida académica hacia la licenciatura, primordialmente por la química o por alguna otra carrera de investigación; y porqué no, otras áreas de estudio.

De esta forma se proyectó el video realizado para esta ocasión especial que nos permitió recordar los inicios de la actividad en el año 2012 con la Escuela Nacional Preparatoria y posteriormente en 2015 con el Colegio de Ciencias y Humanidades, en el año 2017 se integró el programa Jóvenes hacia la investigación de la Dirección general de Divulgación de Ciencia, entre los años 2018 y 2020 correspondió la integración a las Escuelas: Preparatoria La Salle del Pedregal, Universidad la Salle y Colegio Simón Bolívar, con agrado durante el año 2021 el Instituto Miguel Ángel y del Colegio Madrid.

Adicional a las estancias cortas, el video nos permitió recordar otras actividades de divulgación que, de la mano con la ENP y CCH, nos han permitido un acercamiento adicional a los alumnos de bachillerato, siendo el caso de los Ciclos de Conferencias “Química en tu vida. Una visión del Instituto de Química”, que se llevan a cabo desde el año 2014, y que se han realizado también en el marco de fechas importantes como los 145 y 150 años de la ENP, el 50 Aniversario de la RMN en México, del 75 aniversario del IQ, del 50 Aniversario del Colegio de Ciencias y Humanidades y el último ciclo en el marco del 80 Aniversario del IQ. Debido a la contingencia por COVID-19 el nombre del Ciclo se modificó a *“La Química en tiempos de pandemia: Una visión del instituto de Química”*.

Cabe destacar que durante la pandemia de COVID-19 presentada desde el año 2020, nos adaptamos a las circunstancias con el fin de seguir con la actividad, es por eso que del 24 de mayo al 04 de junio se llevó a cabo el programa de Estancias Cortas de Investigación, esta vez bajo el nombre de “La Semana web”. La investigación y la distancia, en esta ocasión y bajo la modalidad en línea, nos fue posible contar con la asistencia de 845 personas; durante dos semanas se realizaron talleres, conferencias,



Foto de izquierda a derecha: M. en C. Marcela Castillo Figa (Secretaria de Vinculación del IQ-UNAM), Dr. Gabriel Eduardo Cuevas González Bravo (Ex-Director del IQ-UNAM), Dr. Jorge Peón Perlata (Director del IQ-UNAM), el Dr. Jesús Valdés Martínez (Investigador Titular "C" del IQ-UNAM y pionero de las estancias cortas) y el Dr. Felipe León Olivares (Profesor de la ENP-UNAM).

mesas redondas, conferencias magistrales, seminarios en distintos temas: *Usos de la Biotecnología; Inteligencia artificial; Manufactura en el espacio; taller de Nanociencias; Veneno de alacrán rojo, obstruye metástasis en tres tipos de cáncer; Desarrollo de una vacuna COVID-19; Investigación y desarrollo de vacunas y aspectos regulatorios; Resistencia antimicrobiana (RAM)*, entre otros, también se realizaron dos visitas virtuales a los laboratorios del Instituto de Química así como a la planta de Sanofi México, todas las actividades mencionadas fueron posible gracias a la participación de la Sociedad Estudiantil de Nanotecnología, Asociación Mexicana de Industrias de Investigación Farmacéutica (AMIIF), Grupo de trabajo de la Resistencia Antimicrobiana del Instituto de Química, Académicos del Instituto de Química, Lic. en Nanotecnología Genaro Soto Valle Angulo, Dr. Baldomero Esquivel, Dr. Federico del Río, Dra. Claudia Moctezuma y el grupo de trabajo de Glaxo Smith Kline México y Janssen México.

Continuando con la ceremonia, se dio paso a las palabras que nos compartieron las diferentes autoridades presentes que iniciaron con el programa Dr. Gabriel Eduardo Cuevas González Bravo, ex director del Instituto de Química, Mtra. Maribel Espinosa entonces jefa del Colegio de Química de la ENP, el Dr. Jesús Valdés Martínez ex secretario de Vinculación del Instituto de Química, la bióloga María Dolores Valle Martínez, Directora General de la Escuela Nacional Preparatoria, el Dr. Benjamín Barajas Sánchez, Director General del Colegio de Ciencias



Ex-alumnos de las Estancias Cortas y el Coordinador de la Investigación Científica de la UNAM el Dr. William Lee Alardín.



Dr. Abel Moreno Cárcamo, ex-estudiante de las Estancias Cortas y Mtra. Marcela Castillo Figa.



Mensaje del Coordinador de la Investigación Científica de la UNAM el Dr. William Lee Alardín.

y Humanidades, concluyendo con la participación del Dr. William Lee Alardín, Coordinador de la Investigación Científica de la UNAM y el Dr. Leonardo Lomelí Vanegas, Secretario General de la UNAM quienes coincidieron en la importancia y continuidad del programa.

Para cerrar el evento, ex alumnos participantes en diferentes ediciones del programa de Estancias Cortas de Investigación nos compartieron su experiencia durante su estancia, así como el impacto que ésta tuvo en ellos. Fue un enorme gusto recibirlos de nuevo en el Instituto de Química, escuchar su experiencia y saber que siguieron el camino de la investigación, gracias Alberto Tomich Hernández ex alumno del CCH, Tania Trejo Reyes ex alumna del CCH, Emiliano Arteaga García ex alumno de la ENP y Naomi Herrera de la Cueva, ex alumna de la ENP.

Finalmente, gracias a todos y todas las personas que durante 10 años han colaborado con el programa de Estancias Cortas de Investigación, autoridades, investigadores, profesores, personal de apoyo, alumnos y alumnas, y a toda la comunidad del Instituto de Química, que siempre nos han apoyado en esta importante actividad con el bachillerato.



M. en C. Guillermo Roura Pérez, la alumna de las Estancias cortas de Investigación y el Dr. José Guadalupe López Cortés.



Dr. Jorge Peón Peralta (Director del IQ-UNAM) y la M. en C. Marcela Castillo Figa (Secretaria de Vinculación del IQ-UNAM).



Foto de los invitados especiales al evento.

Secretaría de Vinculación del  
Instituto de Química de la UNAM.  
Fotos. H. Segura y equipo de Vinculación.

# Informe de Actividades 2018-2022

## Instituto de Química de la UNAM

Joselín Desiré Pagaza y Hortensia Segura Silva

El Dr. Jorge Peón Peralta, Director del Instituto de Química (IQ), presentó su Informe de Actividades 2018-2022 ante el Dr. Enrique Graue Wiechers, rector de la Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM); la Dra. Ana Rosa Barahona Echeverría, presidenta en turno de la Junta de Gobierno; el Dr. William Lee Alardín, coordinador de la Investigación Científica y demás autoridades de la Universidad, investigadores eméritos, exdirectores, académicos, investigadores y personal del Instituto de Química.

Actualmente el Instituto está conformado por un total de 68 investigadores y 44 técnicos académicos, habiendo tenido 8 contrataciones recientes y con un crecimiento en el porcentaje de mujeres investigadoras, hasta alcanzar un 27.5%.



Foto: Nuevo Laboratorio de Productos Naturales del IQ-UNAM.

El director destacó un aumento en la cantidad de publicaciones indexadas por parte del IQ, llegando a más de 150 artículos por año, mientras que durante el 2020 se alcanzó el mayor número histórico con 208, publicados mayormente en revistas de Q1 (58%) y Q2 (28%), sumando la mayor cantidad de contribuciones a nivel latinoamérica, de acuerdo al American Chemical Society.

El IQ atendió durante la pandemia a 376 alumnos, resaltando que es la segunda entidad del subsistema de la investigación con el mayor número de graduados,



El Dr. Jorge Peón Peralta presentó de manera virtual su informe de Actividades 2018-2022.

pero la primera en porcentaje, con un promedio de que cada investigador tituló a 5 alumnos aproximadamente.

También señaló que a partir del 2014, el IQ ha presentado 45 solicitudes de patentes ante el Instituto Mexicano de la Propiedad Industrial, de las cuales se le han concedido 23, posicionándose en el tercer lugar con la mayor cantidad de solicitudes entre todas las escuelas, facultades e institutos de la UNAM.

Asimismo mencionó que se siguen impartiendo los cursos de introducción al Instituto, donde los alumnos reciben capacitaciones acerca de los servicios académicos, biblioteca, ética e igualdad de género, cómputo y tecnologías de la información, comunicación, seguridad en el laboratorio y manejo de residuos peligrosos. Dichos cursos se volvieron virtuales debido a la contingencia por la COVID-19, y para ello se hizo uso de una plataforma web.

Respecto a la vinculación académica, hizo referencia al Centro Conjunto de Investigación en Química Sustentable (CCIQS), donde, los técnicos académicos del IQ, además de encargarse de la sección de Servicios Analíticos, han organizado capacitaciones en técnicas analíticas para estudiantes de dicho Centro y de la Facultad de Química de la UAEM.

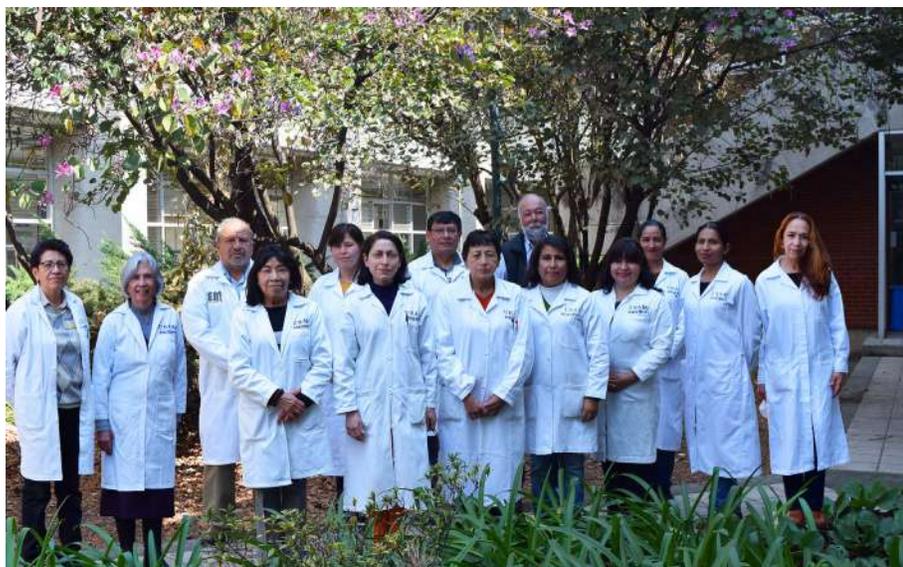


Foto: Técnicos Académicos del Instituto de Química de los Laboratorios Certificados en el jardín del edificio A.



Foto: Nuevo Laboratorio de Microbiología del IQ-UNAM.

Resaltó la creación del Centro Alemán-Latinoamericano de Investigación y Formación en Infección y Epidemiología (GLACIER, por sus siglas en inglés) dirigido al desarrollo de nuevos antibióticos, además de buscar favorecer el intercambio de académicos con otras instituciones a nivel mundial; así como la cooperación con el Consorcio Berkeley Global Science Institute, el Laboratorio Internacional Asociado LIA México-Francia: Laboratoire de Chimie Moléculaire avec applications dans les Matériaux et la Catalyse (LCMMC) y los proyectos UC México-CONACYT. Apuntó también que está en proceso la firma del convenio de licenciamiento de tecnología con el Cancer Research UK.

El IQ aportó al manejo de la contingencia por COVID-19, teniendo participación en proyectos de investigación relacionados con la pandemia, tales como el desarrollo de un biosensor genético de SARS-CoV 2 y un estudio piloto para comparar cuatro estrategias terapéuticas en colaboración con otras instancias.

Igualmente, el IQ mantuvo un apoyo directo mediante una línea de producción de soluciones y medios de transporte para pruebas PCR en conjunto con las Facultades de Medicina y Química de la UNAM, alcanzando la cifra de más de 750,000 medios de transporte, al llegar a producir hasta 25,000 kits a la semana.

En los últimos años se llevó a cabo una mejora en la infraestructura perteneciente al IQ y se construyeron

nuevos laboratorios, entre los cuales se encuentran los laboratorios de Microbiología, Nanopartículas, Química Inorgánica, Cultivo Celular, Catálisis y Microfluídica. También se adquirieron equipos mayores con el apoyo y financiamiento del BGSi.

A favor de una mayor proyección nacional de la investigación en Química en otras zonas geográficas, se creó la Unidad Académica del Instituto de Química en Mérida, Yucatán, la cual estará enfocada a estudios de química biológica, ciencia de datos e inteligencia artificial.

En materia de comunicación y divulgación, el IQ continuó organizando sus estancias de investigación para alumnos de bachillerato, cambiando a un formato web durante la contingencia, asimismo participó en más de 20 eventos de divulgación e impartió más de 60 conferencias en la Escuela Nacional Preparatoria (ENP) y se concedieron 28 entrevistas en distintos medios de comunicación, destacando los temas referentes a la COVID-19. De igual modo, la Comisión de Igualdad de Género organizó distintos eventos y diseñó infografías a fin de generar conciencia y erradicar la violencia de género.

Para finalizar, se reconocieron a diversos investigadores e investigadoras, quienes han tenido participaciones destacadas y premios en materia de Química y se agradeció al equipo de trabajo del IQ.

# Designación del Dr. Luis Demetrio Miranda Gutiérrez como director del IQ-UNAM (2022-2026)

Joselín Desiré Pagaza y Katy Fonseca Salcedo



La Junta de Gobierno de la UNAM en su sesión ordinaria del día 2 de mayo del 2022, designó como Director electo del Instituto de Química al Dr. Luis Demetrio Miranda Gutiérrez, quien ocupará el cargo durante los siguientes 4 años (periodo 2022-2026).

Asimismo, el día 31 de mayo del año en curso, dentro de las instalaciones de la Biblioteca Jesús Romo Armería del Instituto de Química se llevó a cabo la ceremonia en la cual el Dr. William H. Lee Alardín, Coordinador de la Investigación Científica de la UNAM ratificó la toma de la dirección por el Dr. Luis Miranda.

## Trayectoria

Es doctor en Ciencias Químicas (2000) por la UNAM, graduado en 1994 como químico de la Universidad Autónoma del Estado de México (UAEM).

Realizó una estancia posdoctoral en el Institut de Chimie des Substances Naturelles (ICSN-CNRS) de Gif-sur-Yvette en Francia, bajo la asesoría del Prof. S. Z. Zard. Ingresó al IQ como investigador en 2001. Actualmente es Investigador Titular C de Tiempo Completo, PRIDE D y nivel III en el SNI.

Su laboratorio se encarga de la síntesis de moléculas, algunas de ellas con propiedades anticancerígenas, antiinflamatorias y anti parasitarias; además, han sido empleadas en aplicaciones de microscopía de fluorescencia.

Ha graduado a 36 estudiantes de licenciatura, 30 de maestría y 21 de doctorado, y ha supervisado a 15 investigadores posdoctorales.

Ha escrito 84 artículos de investigación en revistas indizadas, 4 capítulos en libros especializados, tiene 1 patente otorgada y 2 solicitadas.

Algunos de los galardones que ha recibido son: Premio Nacional de Química Andrés Manuel del Río 2019 (SQM), Cátedra de Investigación Marcos Moshinsky 2015 y el Reconocimiento Distinción Universidad Nacional para Jóvenes Académicos 2010 (UNAM).

# El Dr. Edmundo Guzmán Percástegui (CCIQS UAEM-UNAM) obtuvo el Premio Talento EDOMÉX 2021. “Jóvenes Científicos e Investigadores”, en el área de Química, otorgado por el COMECYT

Aleyda Lemus Hernández y Hortensia Segura Silva

En esta primera entrega del Premio Talento Edomex 2021, se reconoció a científicos e investigadores mexiquenses en 10 áreas del conocimiento, la convocatoria congregó a 167 investigadores, provenientes de 40 instituciones en 32 municipios de la entidad, en su mayoría mujeres.

Los ganadores del Premio Talento Edomex 2021 en el rubro de Ciencias Sociales son Humberto Thomé Ortiz y Luisa Gabriela Morales Vega; en Química, Edmundo Guzmán Percástegui y María Fernanda Ballesteros Rivas; en Ciencias Económico-Administrativas, Eduardo Rosas Rojas; en Físico -Matemáticas, Carlos Roberto Fonseca Ortiz; en Arquitectura y Diseño, Yissel Hernández Romero; en Ciencias de la Salud, Clara Santos Cuevas; Ciencias Agropecuarias y Biotecnología, María Elena Estrada Zúñiga; en Biología, Martha Zarco González; en Ingeniería y Tecnología, Miriam Flores Merino y en Humanidades y Ciencias de la Conducta, Cristina Alejandra Mondragón Maya.

## Trayectoria del Dr. Edmundo Guzmán Percástegui

El Dr. Edmundo es Doctor en Ciencias Químicas por la Universidad Autónoma de Hidalgo. Durante su doctorado realizó una estancia predoctoral de un año (2011) en el grupo de investigación del Prof. Darren W. Johnson en la Universidad de Oregon (Estados Unidos de América), investigando aspectos supramoleculares de complejos de grupo principal. Fue investigador posdoctoral en el Instituto de Química UNAM bajo la supervisión del Prof. Ivan Castillo (2013-2015), desarrollando sistemas de coordinación basados en calixarenos.



Foto: Dr. Edmundo Guzmán Percástegui y el Dr. Luis Demetrio Miranda Gutiérrez (Director del Instituto de Química). Crédito: Hortensia Segura Silva.

Finalmente, realizó estudios posdoctorales de 2016 a 2018 en el Departamento de Química de la Universidad de Cambridge (Reino Unido) bajo la dirección del Prof. Jonathan R. Nitschke, trabajando en síntesis de receptores metal-orgánicos para encapsulación de especies químicas.

Fue en septiembre de 2018 que se incorporó como investigador al Instituto de Química, adscrito a la sede: Centro Conjunto de Investigación en Química Sustentable CCIQS UAEM-UNAM.

Nos complace felicitar al doctor Guzmán Percástegui por este logro y por el inicio de una destacada carrera científica.

# Nuevas estrategias contra viejos enemigos: la importancia de la Química en el combate de la resistencia microbiana

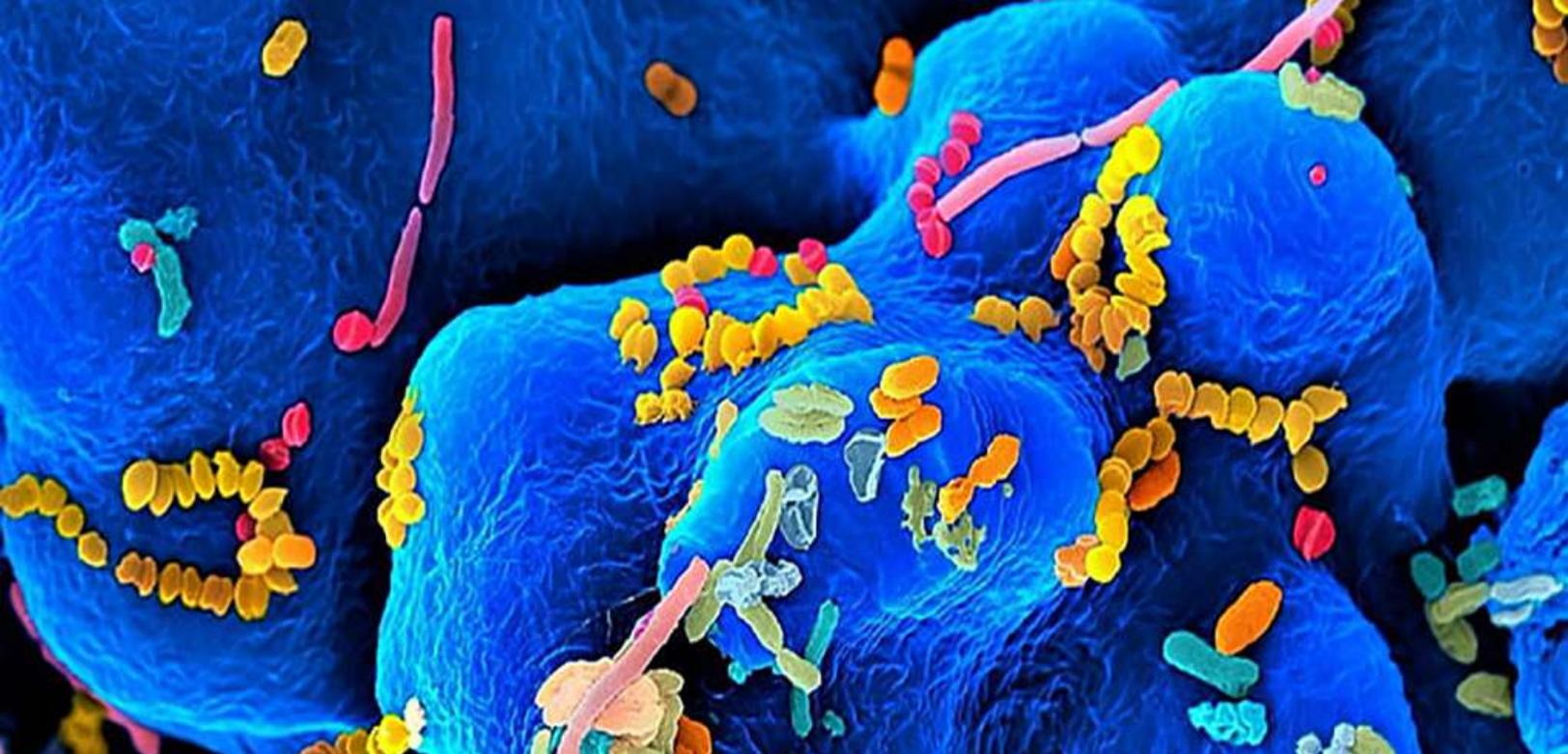
Karol Carrillo-Jaimes y José Rivera-Chávez

Los mecanismos por los cuales un microorganismo deja de ser afectado por uno o varios antimicrobianos a los que anteriormente era sensible se conocen como resistencia antimicrobiana (RAM), fármaco-resistencia o multirresistencia<sup>1</sup>. Este fenómeno ha sido muy bien documentado por la Organización Mundial de la Salud (OMS), la cual ha emitido diferentes boletines de alerta en los últimos 5 años sobre esta pandemia silenciosa<sup>2</sup>. Desde el 2016, la OMS<sup>3</sup> ha advertido a la comunidad científica, a las compañías farmacéuticas y al personal clínico, acerca de la importancia de difundir entre la población las causas de este problema de salud pública y sobre la trascendencia de encontrar y desarrollar antibióticos novedosos para enfrentar la resistencia, que de seguir con la tasa de crecimiento actual, ocasionará más de 10 millones de muertes para el año 2050, posicionándose como la principal causa de muerte en el mundo.<sup>1</sup>

Entre las especies patógenas que con mayor frecuencia "escapan" de manera efectiva a los efectos de los medicamentos antibacterianos de primera elección destacan las bacterias del grupo **ESKAPE** (*Enterococcus faecalis*, *Staphylococcus aureus*, *Klebsiella pneumoniae*, *Acinetobacter baumannii*, *Pseudomonas aeruginosa* y especies de *Enterobacter*). Si bien, esta clasificación sirve como referencia a nivel mundial, no se puede generalizar; por ello, es importante caracterizar la biota de cada país. Por ejemplo, en Estados Unidos de América, *S. aureus* resistente a la metilicina es el agente

patógeno aislado con mayor frecuencia, mientras que en México las Infecciones Asociadas a la Atención a la Salud (IAAS) más habituales son las relacionadas con *K. pneumoniae*, *A. baumannii*, *P. aeruginosa* y *Escherichia coli*, microorganismos que presentan altas tasas de resistencia a cefalosporinas de 3<sup>a</sup> y 4<sup>a</sup> generación y ciprofloxacino, entre otros antibióticos de primera línea<sup>4</sup>.

A pesar de las constantes recomendaciones de la OMS y el enorme desafío que representa la RAM para los distintos sistemas de salud pública a nivel global, son pocos los esfuerzos realizados para tratar de contener su propagación y se estima que durante el siglo XXI se podría llegar a una "era post-antibióticos", en la cual muchas infecciones bacterianas podrían ser intratables, ya que en su mayoría, el arsenal de fármacos antibióticos en el mercado y las estrategias de prevención son inadecuadas para el tratamiento de cepas multirresistentes. Sumado a lo anterior, la industria farmacéutica, desde hace aproximadamente cuatro décadas, abandonó la búsqueda de antimicrobianos, debido principalmente a diversos obstáculos tanto económicos como regulatorios. Si bien, esta actividad representaba una estrategia efectiva para la industria en el pasado, en la actualidad no es considerada una actividad redituable, principalmente porque los antibióticos se usan por tiempos relativamente cortos y la inversión en etapas de investigación y desarrollo no son económicamente atractivas, en comparación con fármacos empleados en el tratamiento de condiciones



o enfermedades crónicas. Por ello, la búsqueda de tácticas alternativas dirigidas a combatir el desarrollo de la resistencia antibacteriana es un reto global para la comunidad científica<sup>5</sup>.

Actualmente muchos grupos de investigación en el mundo generan información sobre la fármaco-resistencia y proponen nuevas estrategias para encontrar soluciones más expeditas,<sup>6</sup> en atención a que el descubrimiento y aprobación de un fármaco sufre escalas de tiempo muy largas y en las diferentes etapas se ve expuesto a limitaciones de recursos, dificultando el avance de los procesos de investigación, desde el desarrollo del proyecto, el descubrimiento y hasta la aprobación del posible fármaco.<sup>6</sup> Una de las estrategias más citadas y que se desea implementar para identificar nuevos compuestos activos es el cribado de alto rendimiento de bibliotecas químicas (*high-throughput screening*).<sup>6</sup> Para este propósito, es importante contar con una base de datos que compile la información más relevante de las moléculas incluidas, para acelerar las etapas de estudio y evitar el redescubrimiento de compuestos ya reportados, y de esta manera evitar el derroche de tiempo y recursos económicos<sup>6</sup>.

Para el adecuado desarrollo de estas bibliotecas es indispensable que los investigadores reporten información acerca del origen, estructura y rutas biosintéticas de la molécula (posibles análogos), además de sus características farmacocinéticas,

farmacodinámicas, toxicidad y posibles vías de administración. Otras propiedades que deben contemplarse y reportarse en esta base de datos son:<sup>6</sup> el espectro de acción de las moléculas propuestas (concentraciones mínimas inhibitorias y bactericidas), las dianas moleculares putativas (estudios de acoplamiento molecular), estudios de relación estructura/actividad (SAR, *structure-activity relationship*), ensayos de resistencia *in-vitro*, ensayos de resistencia en modelos *in-vivo*, ensayos de toxicidad en modelos *in-vivo* y en células humanas, solubilidad, permeabilidad, ensayos de presencia/inhibición de biopelícula, propiedades ácido/base, pka, estabilidad, degradación, entre otras.<sup>6</sup> Esta información puede ser aprovechada por otros grupos de investigación con objetivos similares, evitando la redundancia en sus labores. En etapas posteriores, el análisis de esta información con metodologías de aprendizaje automatizado, sumado a los esfuerzos de la química medicinal, conducirá a que las entidades reguladoras para la aprobación de fármacos (OMS, FDA, EMA) tomen decisiones con mayor rapidez, encaminando a un aumento en la tasa de descubrimiento de nuevos antibióticos<sup>6</sup>.

El diseño, ensamblaje, mantenimiento y actualización de tales bibliotecas son procesos costosos que requieren la participación de profesionales altamente capacitados y de diferentes disciplinas. Con frecuencia, esto queda fuera de las capacidades de financiamiento de la mayoría de los grupos académicos. Es por esto, que otra de las estrategias para agilizar la aprobación de antimicrobianos consiste en reducir las brechas

existentes entre los diferentes grupos de investigación que persigan el mismo fin y la de la academia con la industria farmacéutica <sup>6</sup>. Si la industria farmacéutica patrocina y guía a algunos grupos de investigación sobre las pruebas más relevantes y necesarias para las moléculas líderes, se podrían acelerar las fases preclínicas y clínicas que deben ejecutarse para la aprobación de un fármaco, tal como se abordó con la pandemia de COVID-19. Una mayor colaboración entre la academia y la industria para formar una base de datos exclusiva de la información de antimicrobianos (y sus requisitos de consentimiento), puede ayudar a tomar medidas preventivas y correctivas a través de enfoques innovadores en las líneas del descubrimiento, desarrollo y aprobación de antimicrobianos de nueva generación <sup>6</sup>.

En atención a los llamados de la OMS y considerando el alarmante problema de salud pública que representa la RAM en México, en el Instituto de Química de la UNAM (IQ-UNAM) se ha conformado un grupo de trabajo interdisciplinario con miras al descubrimiento de métodos de diagnóstico de infecciones bacterianas y el desarrollo de antibióticos de nueva generación. Las principales líneas de investigación contemplan la caracterización genética molecular de los perfiles de resistencia de bacterias multirresistentes del grupo ESKAPE, el descubrimiento de antibióticos a partir de fuentes naturales o por vías sintéticas (química farmacéutica o síntesis de novo) apoyadas por métodos computacionales contra nuevos blancos moleculares, el diseño y desarrollo de métodos de diagnóstico basados en tecnologías de virus artificiales y la síntesis de nanopartículas.

En particular, en el laboratorio de productos naturales de origen fúngico del IQ-UNAM, se trabaja con microorganismos fúngicos no patógenos y cepas bacterianas multirresistentes aisladas de ambientes intrahospitalarios para la búsqueda de antibióticos de nueva generación. La metodología empleada en este laboratorio consiste en el

muestreo de ecosistemas inexplorados en el país con alta biodiversidad para el aislamiento de hongos microscópicos, la exploración del metaboloma de microorganismos fúngicos fermentados bajo distintas condiciones (experimentación OSMAC -*One strain many compounds*- que favorece la activación de los genes implicados en la síntesis de metabolitos secundarios), la evaluación del potencial antibiótico de las sustancias producidas bajo las distintas condiciones, el aislamiento de los componentes activos, la caracterización química y bioquímica de las moléculas activas y finalmente, su optimización química (generación de análogos) guiada por estudios computacionales de interacción ligante-proteína y SAR.

Uno de los proyectos que se está ejecutando actualmente consiste en descubrir antibióticos de nueva generación a partir de fermentaciones mixtas de hongos microscópicos con bacterias resistentes, abordando un blanco molecular (enzima FtsZ) poco estudiado. La proteína FtsZ es decisiva en el proceso de división celular bacteriana, ya que es la primera proteína que se dirige al sitio de división celular, y a través de procesos de autopolimerización se ensambla en forma de un anillo (anillo Z) el cual genera una contracción celular que da lugar a dos nuevas células a partir de una. Dirigirse a FtsZ para el desarrollo de antibacterianos ofrece varias ventajas: en primer lugar, FtsZ es esencial para el crecimiento bacteriano; en segundo, la proteína está altamente conservada en procariontes -no se encuentra en células eucariotas animales- y por último, debido a que actualmente no hay aprobado algún fármaco que se dirija hacia esta proteína, se prevé que no presentará resistencia a corto plazo.<sup>7</sup> En conjunto, la combinación de estas estrategias multi-informativas permitirá, en la medida de lo posible, contribuir al descubrimiento de antibióticos de nueva generación que permitan hacer frente a la RAM en el contexto de las prioridades de nuestro país.

## REFERENCIAS:

1. OMS. Marco jurídico internacional para abordar la resistencia a los antimicrobianos. <https://www.who.int/bulletin/volumes/93/2/15-152710/es/> (2015).
2. OMS. La OMS publica la lista de las bacterias para las que se necesitan urgentemente nuevos antibióticos. <https://www.who.int/es/news/item/27-02-2017-who-publishes-list-of-bacteria-for-which-new-antibiotics-are-urgently-needed> (2017).
3. OMS. Plan de acción mundial sobre la resistencia a los antimicrobianos. <https://www.who.int/antimicrobial-resistance/global-action-plan/es/> (2016).
4. PUCRA & UNAM. Estado Actual de la Resistencia Antimicrobiana en México 2018. (2019).
5. Wright, G. D. Opportunities for natural products in 21st century antibiotic discovery. *Nat. Prod. Rep.* 34, 694–701 (2017).
6. Miethke, M. et al. Towards the sustainable discovery and development of new antibiotics. *Nat. Rev. Chem.* 0123456789, (2021).
7. Kusuma, K. D., Payne, M., Ung, A. T., Bottomley, A. L. & Harry, E. J. FtsZ as an Antibacterial Target: Status and Guidelines for Progressing This Avenue. *ACS Infect. Dis.* 5, 1279–1294 (2019).

# Graduados en el IQ



CRISTIÁN LEONARDO  
PINZÓN VANEGAS

Fecha de examen: 17 de enero de 2022.

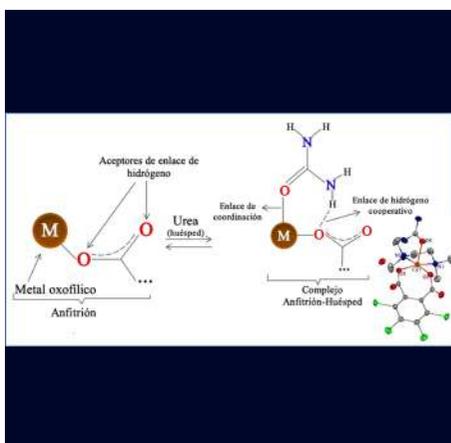
Tesis: Reconocimiento molecular de ureas y derivados por complejos de Cu(II) : síntesis, estudios estructurales y espectroscópicos.

Grado: Maestro en Ciencias Químicas.

Asesor: Dr. Alejandro Dorazco González.

Lugar: Examen vía remota por ZOOM.

Registro: TESIUNAM



ANA BERENICE  
ÁLVAREZ CORTÉS

Fecha de examen: 25 de enero de 2022.

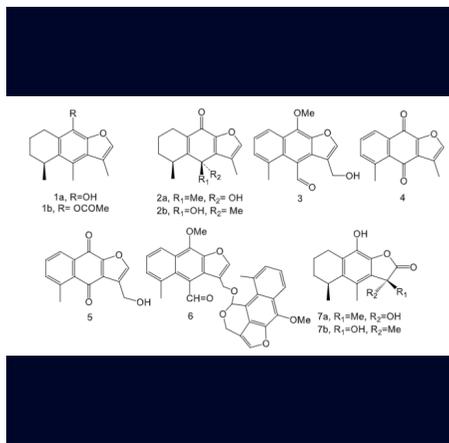
Tesis: Determinación de la estabilidad y toxicidad de sesquiterpenos provenientes de la raíz de psacalium decompositum.

Grado: Maestra en Ciencias Químicas.

Asesor: Dr. Manuel Jiménez Estrada.

Lugar: Examen vía remota por ZOOM.

Registro: TESIUNAM



: ANDREA ESTEFANÍA  
LÓPEZ GIRALDO

Fecha de examen: 28 de enero de 2022.

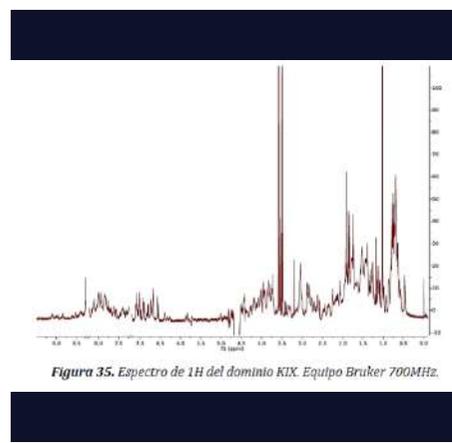
Tesis: Estudio de proteínas con interés biológico y su determinación estructural por resonancia magnética nuclear en disolución.

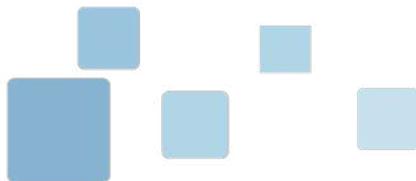
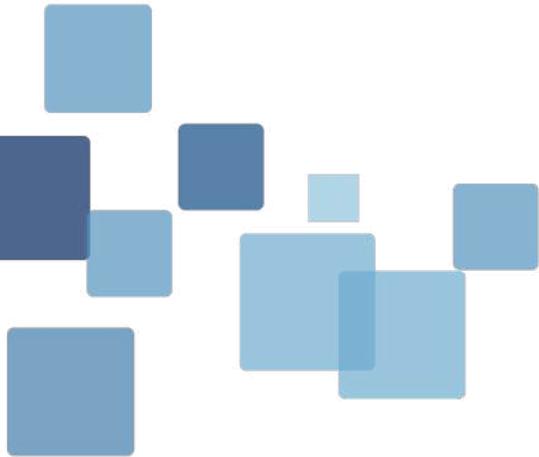
Grado: Doctora en Ciencias Químicas.

Asesor: Dr. José Federico del Río Portilla.

Lugar: Auditorio Lydia Rodríguez Hahn.

Registro: TESIUNAM

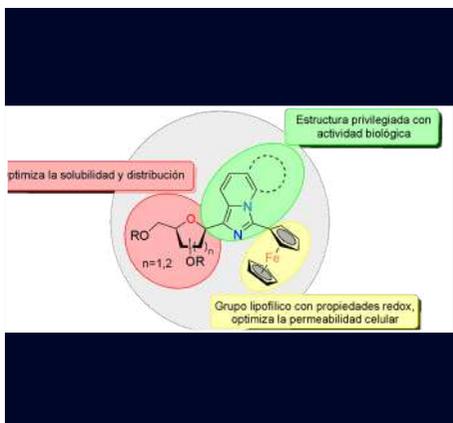




ALEJANDRO  
CASTILLO BALTAZAR

**Fecha de examen:** Enero 2022.  
**Tesis:** *Síntesis de glicósidos de aza-heterociclos ferrocénicos con posible actividad biológica.*  
**Grado:** Maestro en Ciencias Químicas.  
**Asesor:** Dr. José Guadalupe López Cortés.  
**Lugar:** Auditorio Lydia Rodríguez Hahn.

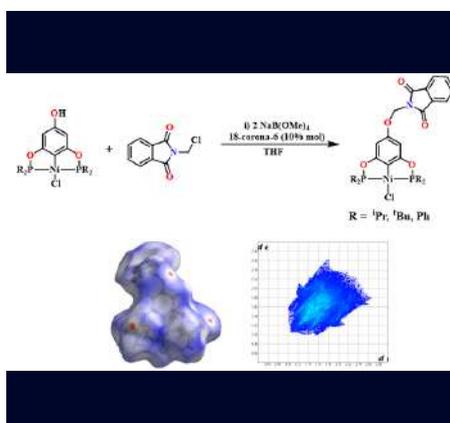
Registro: TESIUNAM



DAMIAN ANDRÉS  
AMAYA FLOREZ

**Fecha de examen:** Enero 2022.  
**Tesis:** *Síntesis, caracterización y evaluación citotóxica de compuestos tipo pinza POCOP de Ni(II) para-sustituidos con fragmentos de ftalimida.*  
**Grado:** Maestro en Ciencias Químicas.  
**Asesor:** Dr. David Morales Morales.  
**Lugar:** Auditorio Lydia Rodríguez Hahn.

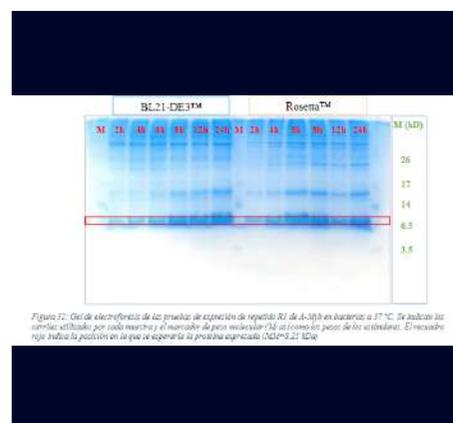
Registro: TESIUNAM



SALOMÓN  
PINEDA SILVA

**Fecha de examen:** Enero 2022  
**Tesis:** *Estudio estructural e interacción del dominio r1 del factor de transcripción A-Myb de humano.*  
**Grado:** Maestro en Ciencias Químicas.  
**Asesor:** Dr. José Federico del Río Portilla.  
**Lugar:** Auditorio Lydia Rodríguez Hahn.

Registro: TESIUNAM





JUAN ALBERTO  
VENEGAS NAVA

Fecha de examen: 7 marzo de 2022.

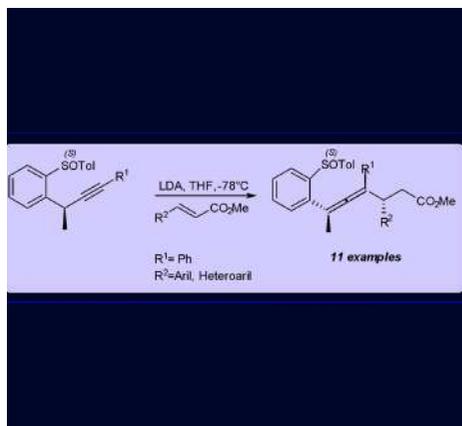
Tesis: Estudio de reacciones de adición conjugada de posiciones propargílico-bencílicas con alquenos electrofílicos.

Grado: Doctor en Ciencias Químicas.

Asesor: Dr. Rubén Trinidad Sánchez Obregón.

Lugar: Auditorio Lydia Rodríguez Hahn.

Registro: TESIUNAM



GUSTAVO  
PRETELIN CASTILLO

Fecha de examen: 9 marzo de 2022.

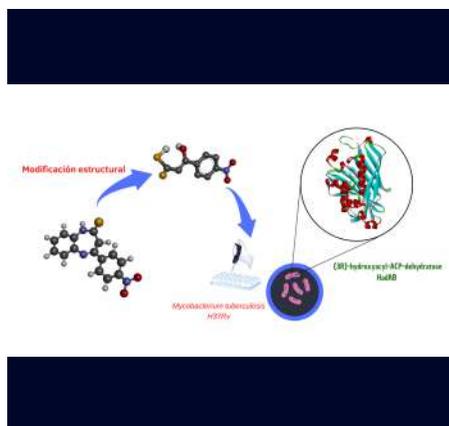
Tesis: Síntesis de 1,5-benzodiazepintonas y evaluación de su actividad antituberculosa y citotóxica.

Grado: Doctor en Ciencias Químicas.

Asesor: Dr. Roberto Martínez.

Lugar: Auditorio Lydia Rodríguez Hahn.

Registro: TESIUNAM



PABLO ARTURO  
AGUILAR RODRÍGUEZ

Fecha de examen: 10 marzo de 2022.

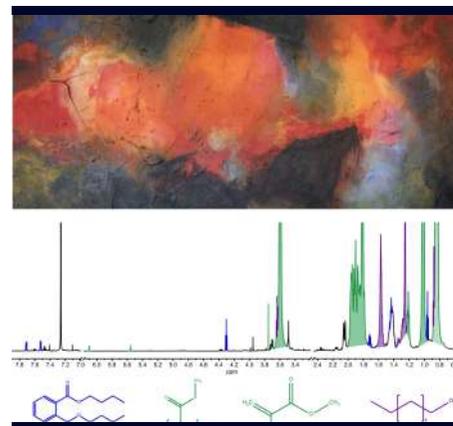
Tesis: Análisis espectroscópico y microscópico de micromuestras de las obras pictóricas: "Aurora de México" y "Muerte al invasor" de David A. Siqueiros y "Paisaje Abstracto" de Rafael Coronel.

Grado: Maestro en Ciencias Bioquímicas.

Asesor: Dra. Nuria Esturau Escofet

Lugar: Auditorio Lydia Rodríguez Hahn.

Registro: TESIUNAM





NERITH ROCÍO  
ELEJALDE CADENA



JAZMÍN  
GARCÍA RAMÍREZ



DAZAET  
GALICIA BADILLO

Fecha de examen: 15 de marzo de 2022.

Tesis: *Investigaciones bioquímicas y estructurales de cascarnes de especies de dinosaurios del período Cretácico Superior y su posible relación con cascarnes de huevo de aves y reptiles arcosaurios.*

Grado: Doctor en Ciencias Químicas.

Asesor: Dr. Abel Moreno Cárcamo.

Lugar: Auditorio Lydia Rodríguez Hahn.

Registro: TESIUNAM

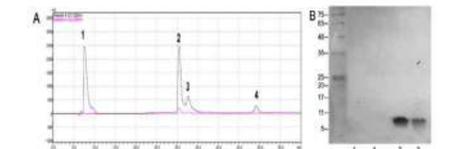


Figura 5-2. A. Cromatograma correspondiente al cascarn de huevo de cocodrilo. B. Gel de SDS-PAGE al 12% de la purificación de las CCA-1 (fracción 2) y CCA-2 (fracción 3) usando fase reversa. El marcador de peso molecular corresponde a BLUEstain™ 2 Protein ladder, 5-285 kDa

Fecha de examen: 15 marzo de 2022

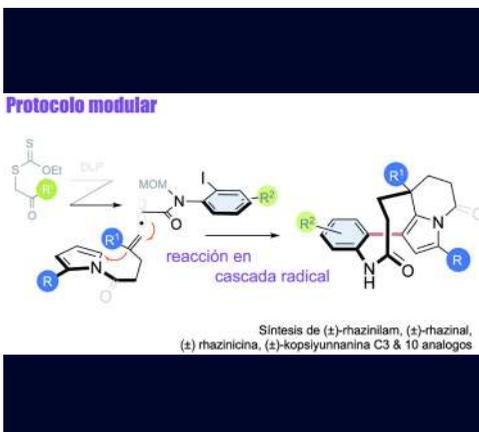
Tesis: *Síntesis de protoaculeina B y derivados de rhazinal y quinazolinona mediante reacciones de adición oxidativa vía radicales libres.*

Grado: Doctora en Ciencias.

Asesor: Dr. Luis Demetrio Miranda Gutiérrez.

Lugar: Auditorio Lydia Rodríguez Hahn.

Registro: TESIUNAM



Fecha de examen: 23 de marzo de 2022.

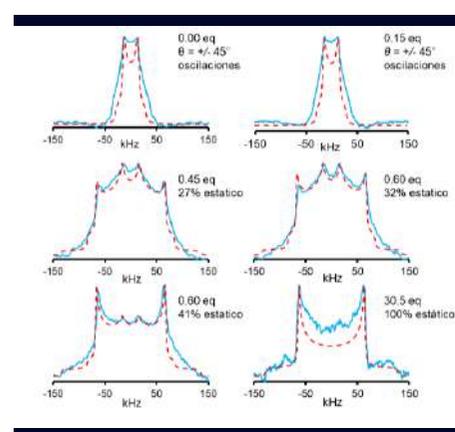
Tesis: *Cambios en la dinámica rotacional en una estructura metal orgánica mediante modificación postsintética.*

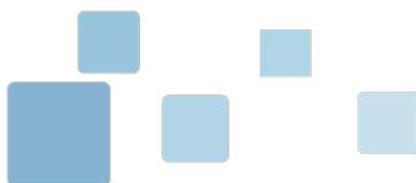
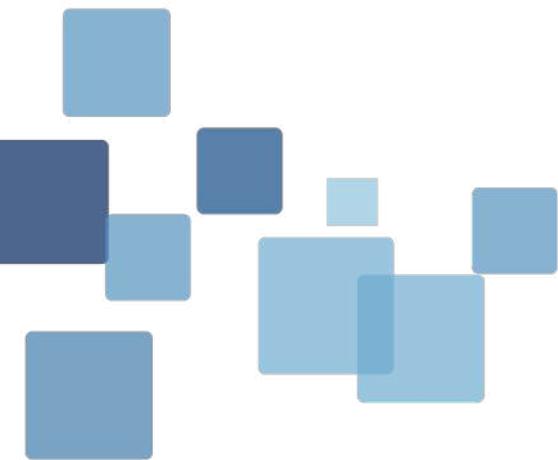
Grado: Maestro en Ciencias Químicas.

Asesor: Dr. Braulio Rodríguez Molina.

Lugar: Auditorio Lydia Rodríguez Hahn.

Registro: TESIUNAM





LILLIAN CISELA  
RAMÍREZ PALMA

**Fecha de examen:** 25 de marzo de 2022.  
**Tesis:** Estudio teórico de las interacciones específicas de complejos de Cu(II) con el ADN.  
**Grado:** Doctora en Ciencias Químicas.  
**Asesor:** Dr. Fernando Cortés Guzmán.  
**Lugar:** Auditorio Lydia Rodríguez Hahn.

Registro: TESIUNAM



JASMINE  
BERNAL ESCALANTE

**Fecha de examen:** marzo 2022.  
**Tesis:** Desarrollo de sondas fluorescentes y péptidos de penetración mitocondrial para microscopía de super resolución STORM.  
**Grado:** Maestra en Ciencias Químicas.  
**Asesor:** Dr. Arturo Jiménez Sánchez.  
**Lugar:** Auditorio Lydia Rodríguez Hahn.

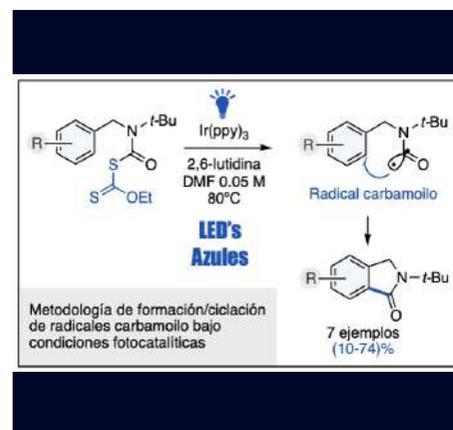
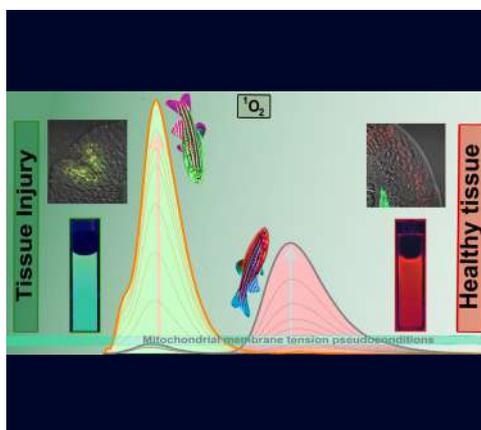
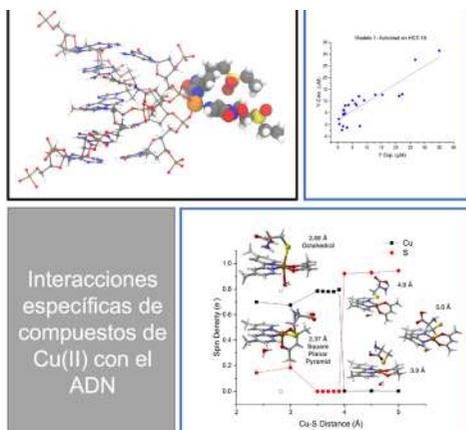
Registro: TESIUNAM



EDUARDO  
ZARZA ACUÑA

**Fecha de examen:** 25 de abril de 2022.  
**Tesis:** Estudio fotocatalítico de la generación de radicales carbamoilo y su aplicación a la síntesis de la conioimida.  
**Grado:** Maestro en Ciencias Químicas.  
**Asesor:** Dr. Luis Demetrio Miranda Gutiérrez.  
**Lugar:** Auditorio Lydia Rodríguez Hahn.

Registro: TESIUNAM





LUIS ANTONIO  
GONZÁLEZ CORTÉS

**Fecha de examen:** 20 de mayo de 2022.  
**Tesis:** *Estudio sintético para la obtención de análogos fluorados de rhazinilam.*  
**Grado:** Maestro en Ciencias Químicas.  
**Asesor:** Dr. Luis Demetrio Miranda Gutiérrez.  
**Lugar:** Auditorio Lydia Rodríguez Hahn.

Registro: TESIUNAM



ANDRÉS DARÍO  
BETANCOURTH URIBE

**Fecha de examen:** 20 de mayo de 2022.  
**Tesis:** *Precursores moleculares tipo PNC para depósito de películas delgadas de calcogenuros de indio.*  
**Grado:** Maestro en Ciencias Químicas.  
**Asesor:** Dra. Verónica García Montalvo.  
**Lugar:** Examen vía remota por ZOOM.

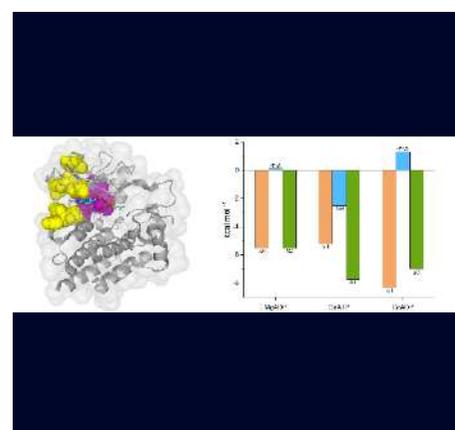
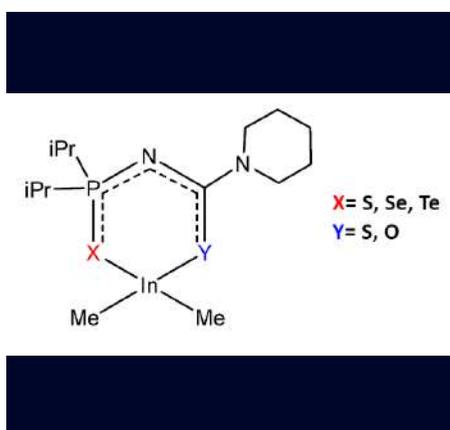
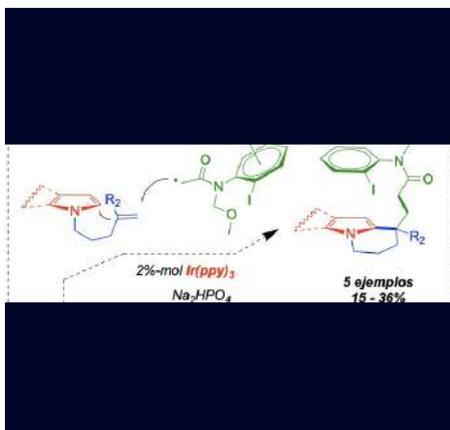
Registro: TESIUNAM



ITZEL  
LÓPEZ GONZÁLEZ

**Fecha de examen:** 27 de mayo de 2022.  
**Tesis:** *Efectos energéticos del reconocimiento de nucleótidos del dominio catalítico de la tirosina-cinasa oncogénica BCR-ABL.*  
**Grado:** Maestra en Ciencias Bioquímicas.  
**Asesor:** Dr. Enrique García Hernández.  
**Lugar:** Examen vía remota por ZOOM.

Registro: TESIUNAM





EDSON ALDAIR  
GARCÍA GARCÍA

**Fecha de examen:** Mayo de 2022.

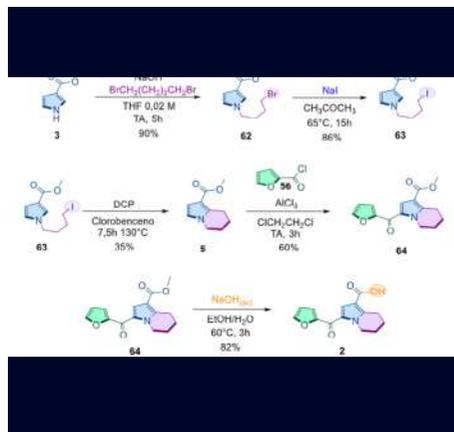
**Tesis:** *Síntesis de la punicagranina utilizando una reacción de ciclación radical oxidativa.*

**Grado:** Maestro en Ciencias Químicas.

**Asesor:** Dr. Luis Demetrio Miranda Gutiérrez.

**Lugar:** Auditorio Lydia Rodríguez Hahn.

Registro: TESIUNAM



CLAUDIA DANIELA  
TORRES ZULUETA

**Fecha de examen:** 16 de junio de 2022.

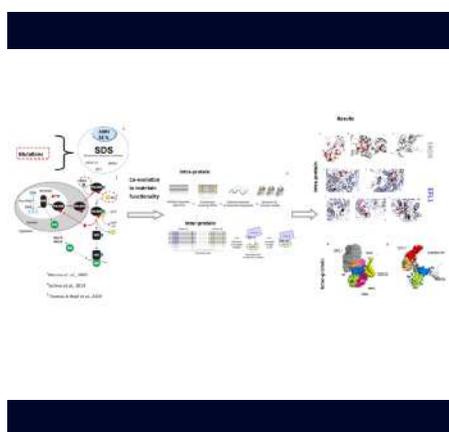
**Tesis:** *Análisis co-evolutivo de las proteínas SDDS y EFL1.*

**Grado:** Maestra en Ciencias Químicas.

**Asesor:** Dra. Nuria Victoria Sánchez Puig.

**Lugar:** Sala de Videoconferencias del IQ.

Registro: TESIUNAM



SAMUEL  
LÓPEZ GODOY

**Fecha de examen:** 28 de junio de 2022.

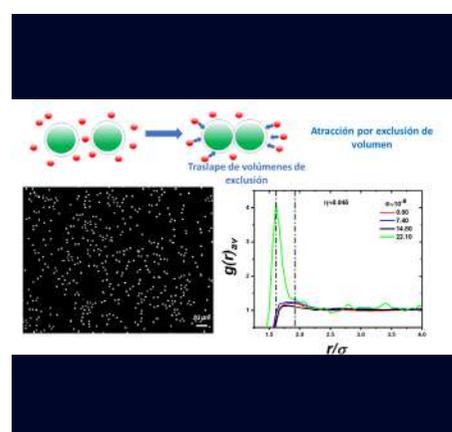
**Tesis:** *Comportamiento de fase en mezclas de suspensiones coloidales.*

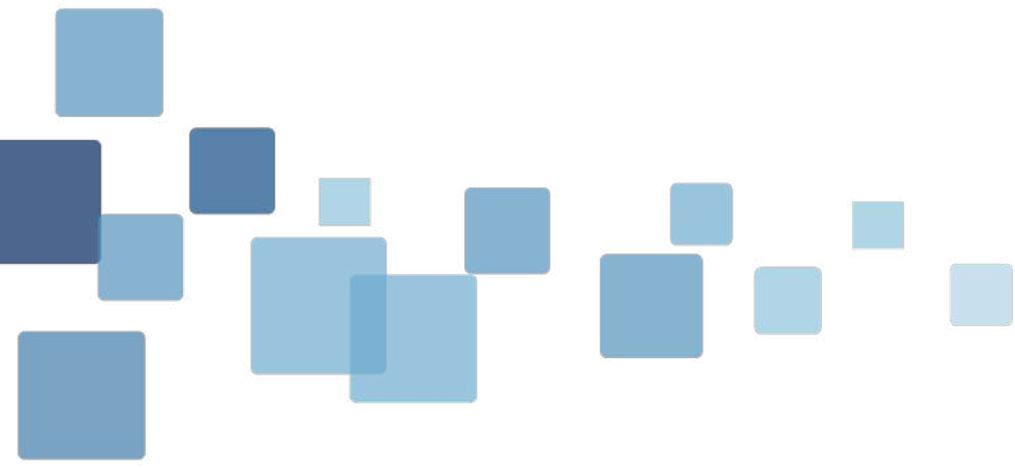
**Grado:** Maestro en Ciencias Químicas.

**Asesor:** Dra. Anna Kózina.

**Lugar:** Auditorio Lydia Rodríguez Hahn.

Registro: TESIUNAM





KARLA VIANEY  
ALMARAZ MACUIL



LUIS PABLO  
AVILA BARRIENTOS



ELISA  
NORZAGARAY VILLARREAL

**Fecha de examen:** 29 de junio de 2022.  
**Tesis:** *Síntesis de lactamas por medio de una reacción de ciclocarbonilación catalizada por paladio.*  
**Grado:** Maestra en Ciencias Químicas.  
**Asesor:** Dr. Manuel José Amézquita Valencia  
**Lugar:** Auditorio Lydia Rodríguez Hahn.

**Fecha de examen:** 30 de junio de 2022.  
**Tesis:** *Diseño computacional y evaluación de inhibidores dirigidos contra la subunidad catalítica de la ATPasa F<sub>1</sub> de Escherichia coli.*  
**Grado:** Doctor en Ciencias Bioquímicas.  
**Asesor:** Enrique García Hernández.  
**Lugar:** Examen vía remota por ZOOM.

**Fecha de examen:** Junio de 2022.  
**Tesis:** *Biosíntesis, purificación y caracterización estructural de las toxinas rOxyTx1 y rOxyTx2 de la araña Oxyopes lyneatus.*  
**Grado:** Maestra en Ciencias Bioquímicas.  
**Asesor:** Dr. José Federico del Río Portilla.  
**Lugar:** Auditorio Lydia Rodríguez Hahn.

Registro: TESIUNAM

Registro: TESIUNAM

Registro: TESIUNAM

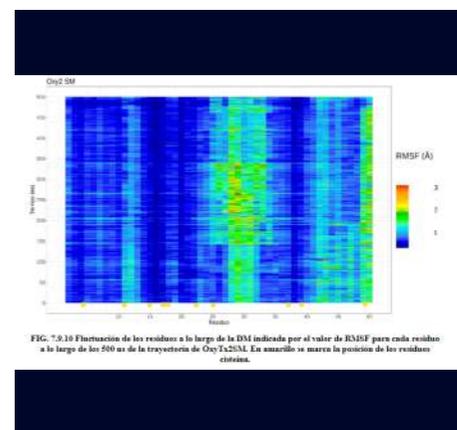
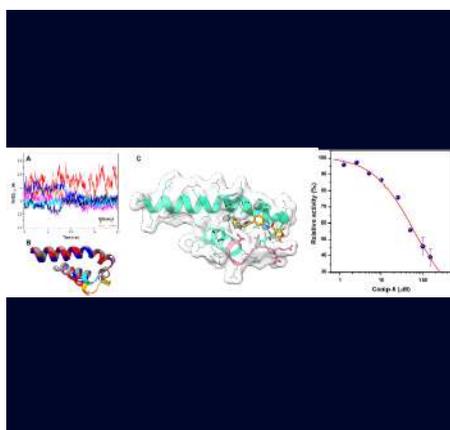
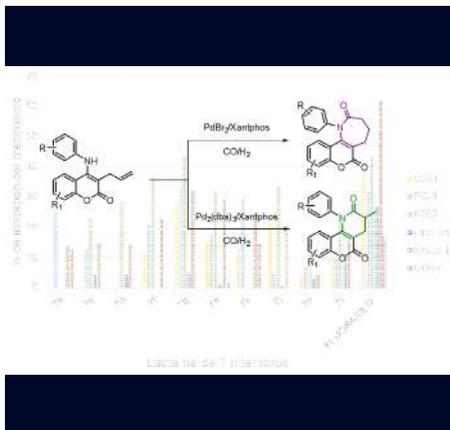


FIG. 7.9.16 Fluctuación de los residuos a lo largo de la DM indicada por el valor de RMSF para cada residuo a lo largo de los 500 ns de la trayectoria de OxyTx2DM. En amarillo se marcan la posición de los residuos catalíticos.