

# GACETA

*digital*  
del Instituto de Química UNAM



Gaceta IQ-UNAM  
Año 8, Número 16

Órgano informativo del Instituto de Química de la UNAM

Enero-junio de 2021



3er LACA SCHOOL

2º INFORME DE ACTIVIDADES DEL COORDINADOR DEL CCIQS

CEREMONIA DE INAUGURACIÓN DEL 80 ANIVERSARIO DEL IQ-UNAM

CICLO DE CONFERENCIAS DEL INSTITUTO DE QUÍMICA & SORBONNE UNIVERSITÉ



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. Jorge Peón Peralta  
Director del Instituto de Química

Año 8, Número 16  
Enero-junio, 2021



## Coordinación Editorial Científica

Dr. Fernando Cortés Guzmán

## Coordinación de Redacción

Lic. Sandra Gpe. Rosas Poblano

## Coordinación Editorial de Diseño

M. en Comunicación y Educación Hortensia Segura Silva

## Comité Editorial 2020-2021

Dr. Jorge Peón Peralta, Lic. Sandra Gpe. Rosas Poblano, Dr. Fernando Cortés Guzmán, M. en C. Marcela Castillo Figa, M. en C. Ed. Hortensia Segura Silva, Dra. Annia Rodríguez Hernández, Dr. Arturo Jiménez Sánchez, Dra. Ana Sofía Varela Gasque, Dra. Diana Corina-Ceapá, Dr. Abraham Madariaga Mazón, Dr. Diego Martínez Otero, Lic. Raquel Feregrino Curiel, María Elena Ortega Quintana, Andrea Irlanda Martínez Rosete, Joselín Desiré Pagaza Nava, Sebastián Avilés Hernández y Jocelyn Ramírez López.

## Fotografías:

Hortensia Segura Silva y Diego Martínez Otero.

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. 16, enero-junio de 2021, 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, 10 de junio de 2021.

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.....	7
NUEVAS CONTRATACIONES.....	14
ARTÍCULO DESTACADO DE INVESTIGACIÓN.....	15
CEREMONIA DE INAUGURACIÓN DEL 80 ANIVERSARIO DEL IQ-UNAM.....	16
3er LACA SCHOOL.....	20
2º INFORME DEL DR. VOJTECH JANCIK COORDINADOR DEL CCIQS UAEM-UNAM.....	24
LOS DERECHOS DE AUTOR ¿QUÉ SON Y EN QUÉ CONSISTEN?.....	27
CURSO DE ESTRUCTURA DE BIOMACROMOLÉCULAS EN SOLUCIÓN (SAXS).....	29
CICLO DE CONFERENCIAS: INSTITUTO DE QUÍMICA DE LA UNAM & SORBONNE UNIVERSITÉ.....	31
EL CENTRO GLACIER.....	32
LA CRISIS DE LOS SEMICONDUCTORES, LOS CONTENEDORES Y LA PANDEMIA DE COVID-19.....	34
VIDEO DEL 80 ANIVERSARIO DEL IQ.....	36
GRADUADOS.....	37

# 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*

El 5 de abril del 2021 se celebró el 80 Aniversario del Instituto de Química de la UNAM. El Instituto inició sus funciones en un pequeño edificio en las instalaciones de Tacuba de nuestra Universidad, compartiendo un espacio con la Escuela Nacional de Ciencias Químicas. El nacimiento del Instituto de Química se debe a la visión original de algunos mexicanos notables, tales como Alfonso Reyes, Daniel Cosío Villegas y Eduardo Villaseñor, entre otros, encargados de promover los inicios de la investigación en México en diversas disciplinas.

Desde su génesis, el Instituto de Química ha jugado un rol central en el desarrollo científico y tecnológico de México. Por ejemplo, en los meses posteriores a la expropiación petrolera el Instituto desarrolló la síntesis industrial del tetraetilo de plomo, el antidetonante que permitió el desarrollo y comercialización de las gasolinas en México. Esto dejó sin efecto el boicot internacional impuesto al país en aquellos años.

Otra aportación histórica del Instituto tuvo que ver con los estudios sobre la alcalinidad del lago de Texcoco, los cuales se relacionan directamente con la fundación de la empresa Sosa Texcoco, una industria de indudable importancia económica para nuestro país.

Entre las principales contribuciones científicas del Instituto también se encuentra el desarrollo de la síntesis de diversas hormonas a partir de productos naturales. En este sentido, las aportaciones del Dr. Jesús Romo Armería respecto a la transformación de la diosgenina o la hecogenina hacia la cortisona han sido reconocidas entre los procedimientos sintéticos más importantes en la historia. Sin duda, en este mismo capítulo es fundamental mencionar los trabajos en conjunto con la empresa Syntex, los cuales, mediante las colaboraciones de dicha industria con el Dr. Luis Miramontes, dieron origen al primer anticonceptivo oral, la 19-Noretisterona.

A lo largo de los años, el Instituto ha venido consolidándose como un referente mundial en los estudios sobre la estructura y las aplicaciones de diversas moléculas que se pueden extraer de fuentes naturales mexicanas. Nuestro Instituto de hecho, se reconoce hasta la fecha como “la catedral de las lactonas terpénicas”, denominación que resume el trabajo de muchas décadas respecto al estudio de diferentes secuencias de metabolitos en múltiples familias de plantas. Hoy en día el mundo entero ubica al Instituto de Química como uno de los sitios más importantes para el entendimiento de las rutas sintéticas naturales del reino vegetal, así como sus aplicaciones en química medicinal.

El Instituto de Química también ha sido un líder a nivel latinoamericano en cuestión de implementación y desarrollo de instrumentación científica. Los primeros equipos de Resonancia Magnética Nuclear se comenzaron a usar en esta entidad en 1965. También fue aquí en donde se realizaron los primeros estudios estructurales de enzimas y proteínas en Latinoamérica. Derivado de todo esto y gracias a la incansable labor de generaciones de investigadores, el Instituto cuenta con dos Laboratorios Nacionales y un Laboratorio Universitario:

El LANEM: Laboratorio Nacional de Estructura de Macromoléculas, donde se estudia la estructura de diversas proteínas y sus complejos con diversos sustratos.

El LANCIC: Laboratorio Nacional de Ciencias para la Investigación y la Conservación del Patrimonio Cultural, donde se estudia la composición y la restauración de obras de arte mexicanas, desde la época precolombina hasta la actual.

El LURMN: Laboratorio Universitario de Resonancia Magnética Nuclear, donde se cuenta con la mejor infraestructura a nivel latinoamericano para esta técnica y donde se realizan desde estudios de la

estructura y dinámica molecular, hasta estudios sobre el metabolismo humano gracias a diversas colaboraciones con los Institutos Nacionales de Salud.

El Instituto hoy en día cuenta con 68 investigadores y publica más de 200 artículos de investigación indizados al año donde más del 90 por ciento de estos trabajos se publican en revistas científicas con alto índice de impacto de los cuartiles 1 y 2. Un claro ejemplo del reconocimiento de esta investigación se dio justamente el año pasado, cuando la *American Chemical Society* definió la lista de los trabajos latinoamericanos más importantes en química de años recientes. En esta lista, el Instituto de Química encabezó a todos los centros y universidades de Latinoamérica con el mayor número de contribuciones científicas de esta destacada lista.

Actualmente, el Instituto de Química mantiene una presencia internacional no solo en sus publicaciones, sino también en convenios de interacción con las mejores universidades del mundo. En este sentido, destaca que, en 2018, el Instituto de Química se convirtió en el décimo nodo del consorcio internacional de ciencia conocido como *Berkeley Global Science Institute*, el cual conjunta a varios de los centros de química más importantes a nivel mundial, incluyendo sedes en Estados Unidos, Japón, Alemania, Corea del Sur, etc. Los objetivos del *Berkeley Global Science Institute* son la realización de proyectos en colaboración con el área de las ciencias moleculares, así como el intercambio de estudiantes e investigadores.

Desde su concepción en 1941, una de las prioridades del Instituto de Química ha sido la formación de recursos humanos. Desde hace varios años el Instituto se encuentra en los primeros lugares respecto a alumnos graduados por investigador en el Subsistema de la Investigación Científica de la UNAM. En los laboratorios del IQ-UNAM se han formado miles de profesionales. El modelo de funcionamiento del Instituto incluye diversos mecanismos para que los alumnos tengan el mayor contacto posible con los instrumentos y una capacitación directa en las técnicas experimentales respectivas. Lo anterior complementa su formación profesional y los hace más competitivos en el mercado laboral.

En cuanto al acercamiento del IQ con el alumnado de la UNAM, también es preciso mencionar los programas de colaboración del Instituto con el Bachillerato. Se

mantiene un contacto cercano tanto con los alumnos de la Escuela Nacional Preparatoria, como con los del Colegio de Ciencias y Humanidades, mediante diferentes series de conferencias en las distintas sedes del Bachillerato-UNAM y un exitoso *Programa de Estancias de Investigación*, en el que los alumnos de la ENP, el CCH y otras Escuelas del Sistema Incorporado, pasan hasta dos meses en los laboratorios del IQ, participando directamente en proyectos de investigación y conviviendo con los alumnos de posgrado y académicos del Instituto.

En lo que respecta a los desarrollos tecnológicos actuales del Instituto y su vinculación con los sectores público y privado, cabe destacar que, como fruto de los años de experiencia, hoy se tienen aproximadamente 10 proyectos vinculados en curso, que van desde el desarrollo de nuevos lubricantes para la industria automotriz y aeroespacial, hasta el desarrollo de nuevos fármacos antivirales y nuevos métodos de diagnóstico de infecciones. Además, la vinculación con el sector salud está teniendo logros importantes. Esto se da, por ejemplo, mediante colaboraciones entre nuestros laboratorios con el Instituto Nacional de Pediatría o el Instituto Nacional de Neurología y Neurocirugía, donde se están desarrollando métodos para caracterizar de forma detallada el estado metabólico de pacientes con diversos padecimientos.

La celebración de los 80 años del Instituto se realizará a lo largo del año 2021 con diferentes eventos académicos. Entre ellos se encuentran foros de reflexión sobre el futuro de la investigación en química, encuentros de los alumnos actuales del IQ con los exalumnos egresados de los Posgrados en Química de la UNAM, conferencias con investigadores líderes en áreas como la catálisis y la síntesis orgánica, y por último, un encuentro entre el IQ de la UNAM con investigadores de la Sorbonne Université, con el objetivo de fortalecer las colaboraciones internacionales con esa importante universidad francesa.

**Dr. Jorge Peón Peralta**  
**Director del Instituto de Química**

- Aguilar-Rodríguez, P.; Mejía-González, A.; Zetina, S.; Colín-Molina, A.; **Rodríguez-Molina, B.**; **Esturau-Escofet, N.**\* Unexpected behavior of commercial artists' acrylic paints under UVA artificial aging. *Microchem. J.* **2021**, *160 B*, 105743.  
<https://doi.org/10.1016/j.microc.2020.105743>
- Avila-Gutierrez, L.; Cetina-Mancilla, E.; Hernández-Cruz, O.; González, G.; Huerta Arcos, L.; **Gaviño, R.**; **Cárdenas, J.**; Vivaldo-Lima, E.; Zolotukhin, M.G.\* Multifunctional polymer-assisted spontaneous transformation of thin gold films into nanoparticles. *React. Funct. Polym.* **2021**, *164*, 104928.  
<https://doi.org/10.1016/j.reactfunctpolym.2021.104928>
- Badillo-Gómez, J.I.; Sánchez-Rodríguez, E.P.; **Toscano, R.A.**; Gouygou, M.; **Ortega-Alfaro, M.C.**; **López-Cortés, J.G.**\* Ruthenium complex based on [N,N,O] tridentate-2-ferrocenyl-2-thiazoline ligand for catalytic transfer hydrogenation. *J. Organomet. Chem.* **2021**, *932*, 121630.  
<https://doi.org/10.1016/j.jorganchem.2020.121630>
- Ballinas-Indilí, R.; Gómez-García, O.; Treviño-Crespo, E.; Andrade-Pavón, D.; Villa-Tanaca, L.; **Toscano, R.A.**; **Álvarez-Toledano, C.**\* One-pot synthesis of dihydropyridine carboxylic acids via functionalization of 3-((trimethylsilyl) ethynyl)pyridines and an unusual hydration of alkynes: Molecular docking and antifungal activity. *Tetrahedron.* **2021**, *86*, 132086.  
<https://doi.org/10.1016/j.tet.2021.132086>
- Banales-Leal Y.; García-Rodríguez A.; Cuétara-Guadarrama F.; Vonlanthen M.; Sorroza-Martínez K.; **Morales-Morales D.**; Rivera E.\* Design of flexible dendritic systems bearing donor-acceptor groups (pyrene-porphyrin) for FRET applications. *Dyes Pigm.* **2021**, *19*, 109382.  
<https://doi.org/10.1016/j.dyepig.2021.109382>
- Barrera, H.; Ureña-Nuñez, F.; Barrios, J.A.; Becerril, E.; **Frontana-Uribe, B.A.**; Barrera-Díaz, C.E.\* Degradation of nonylphenol ethoxylate 10 (NP<sub>10</sub>EO) in a synthetic aqueous solution using a combined treatment: Electrooxidation-gamma irradiation. *Fuel.* **2021**, *283*, 118929.  
<https://doi.org/10.1016/j.fuel.2020.118929>
- Bazany-Rodríguez, I.J.; Salomón-Flores, M.K.; Viviano-Posadas, A.O.; García-Eleno, M.A.; **Barroso-Flores, J.**; **Martínez-Otero, D.**; **Dorazco-González, A.**\* Chemosensing of neurotransmitters with selectivity and naked eye detection of L-DOPA based on fluorescent Zn(ii)-terpyridine bearing boronic acid complexes. *Dalton Trans.* **2021**, *50*, 4255-4269.  
<https://doi.org/10.1039/d0dt04228e>
- Benitez-Medina, G.E.\*; Flores, R.; Vargas, L.; Cuenu, F.; **Sharma, P.**; Castro, M.; Ramírez, A. Hybrid material by anchoring a ruthenium(ii) imine complex to SiO<sub>2</sub>: preparation, characterization and DFT studies. *RSC Adv.* **2021**, *11*, 6221-6233.  
<https://doi.org/10.1039/d0ra09282g>
- Borja-Miranda, A.; Valencia-Villegas, F.; Luján-Montelongo, J.A.; **Polindara-García, L.A.**\* Synthesis of polysubstituted isoindolinones via radical cyclization of 1,3-dicarbonyl Ugi-4CR adducts using tetrabutylammonium persulfate and TEMPO. *J. Org. Chem.* **2021**, *86*, 929-946.  
<https://doi.org/10.1021/acs.joc.0c02441>
- Bustos-Brito, C.; Pérez-Juanchi, D.; **Rivera-Chávez, J.**; Hernández-Herrera, A.D.; Bedolla-García, B.Y.; Zamudio, S.; **Ramírez-Apan, T.**; **Quijano, L.\***; **Esquivel, B.\*** Clerodane and 5 10-seco-clerodane-type diterpenoids from *Salvia involucrata*. *J. Mol. Struct.* **2021**, *1237*, 130367.  
<https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2021.130367>
- Calcines-Cruz, C.; Finkelstein, I.J.\*; **Hernández-García, A.\*** CRISPR-guided programmable self-assembly of artificial virus-like nucleocapsids. *Nano Lett.* **2021**, *21*, 7, 2752-2757.  
<https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.0c04640>
- Cárdenas-Hernández, H.; Titau-Delgado, G.A.; Castañeda-Ortiz, E.J.; Torres-Larios, A.; Brieba, L.G.; **Del Río-Portilla, F.\***; Azuara-Liceaga, E.\* Genome-wide and structural analysis of the Myb-SHAQKYF family in *Entamoeba histolytica*. *Biochim. Biophys. Acta, Proteins Proteomics.* **2021**, *1869*, 140601.  
<https://doi.org/10.1016/j.bbapap.2021.140601>
- Centeno-Betanzos, L.Y.; **Reyes-Chilpa, R.\***; Pigni, N.B.; Jankowski, C.K.; Torras-Claveria, L.; Bastida, J.\* Plants of the 'Libellus de Medicinalibus Indorum Herbis' from Mexico, 1552. *Zephyranthes fosteri* (Amaryllidaceae) Alkaloids. *Chem. Biodiversity.* **2021**, *18*, 3.  
<https://doi.org/10.1002/cbdv.202000834>
- Cerón-Camacho, R.; Roque-Ramires, M.A.; Ryabov, A.D.; **Le Lagadec, R.\*** Cyclometalated osmium compounds and beyond: Synthesis, properties, applications. *Molecules.* **2021**, *26*, 1563.  
<https://doi.org/10.3390/molecules26061563>
- Chávez-Riveros, A.; **Hernández-Vázquez, E.**; Ramírez-Trinidad, Á.; Nieto-Camacho, A.; **Miranda, L.D.\*** Multicomponent synthesis and preliminary anti-

inflammatory activity of lipophilic diphenylamines. *Bioorg. Med. Chem. Lett.* **2021**, *38*, 127860.

<https://doi.org/10.1016/j.bmcl.2021.127860>

Chirinos-Flores, D.; Sánchez, R.; Díaz-Leyva, P.; **Kozina, A.\*** Gelation of amphiphilic Janus particles in an apolar medium. *J. Colloid Interface Sci.* **2021**, *590*, 12-18.

<https://doi.org/10.1016/j.jcis.2021.01.039>

Díaz A.; Muñoz-Arenas G.; Caporal-Hernandez K.; Vázquez-Roque R., Lopez-Lopez G., **Kozina A.**; Espinosa B.; Flores G.; Treviño S.; Guevara J. Gallic acid improves recognition memory and decreases oxidative-inflammatory damage in the rat hippocampus with metabolic syndrome. *Synapse* **2021**, *75*, e22186.

<https://doi.org/10.1002/syn.22186>

Delgado-Altamirano, R.; García-Aguilera, M.E.; Delgado-Domínguez, J.; Becker, I.; Rodríguez de San Miguel, E.; Rojas-Molina A.; **Esturau-Escofet N.\*** <sup>1</sup>H NMR profiling and chemometric analysis as an approach to predict the leishmanicidal activity of dichloromethane extracts from *Lantana camara* (L.). *J. Pharm. Biomed. Anal.* **2021**, *19930*, 114060.

<https://doi.org/10.1016/j.jpba.2021.114060>

Díaz-Rojas, M.; Raja, H.; González-Andrade, M.; **Rivera-Chávez, J.**; Rangel-Grimaldo, M.; Rivero-Cruz, I.; Mata, R.\* Protein tyrosine phosphatase 1B inhibitors from the fungus *Malbranchea albolutea*. *Phytochemistry*. **2021**, *184*, 112664.

<https://doi.org/10.1016/j.phytochem.2021.112664>

Elejalde-Cadena, N.R.; **Moreno, A.\*** Fractal analysis of the distribution and morphology of pores in dinosaur eggshells collected in Mexico: Implications to understand the biomineralization of calcium carbonate. *ACS Omega* **2021**, *6*, 11, 7887–7895.

<https://doi.org/10.1021/acsomega.1c00478>

Espinoza-Pérez, L.J.; López-Honorato, E.\*; González, L.A.; **García-Montalvo, V.** Comparative study of three yttrium organometallic compounds for the stabilization of the cubic phase in YSZ deposited by PE-CVD. *Ceram. Int.* **2021**, *47*, 4, 4611-4624.

<https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2020.10.028>

Fernández-Alarcón, A.; Guevara-Vela, J.M.; Casals-Sainz, J.L.; Francisco, E.; Costales, A; Martín Pendas, A.; **Rocha-Rinza, T.\*** The nature of the intermolecular interaction

in (H<sub>2</sub>X)<sub>2</sub> (X = O, S, Se). *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2021**, *23*, 10097–10107.

<https://doi.org/10.1039/d1cp00047k>

**Finkelstein-Shapiro, D.\***; Mante, P.A.; Sarisozen, S.; Wittenbecher, L.; Minda, I.; Balci, S.; Pullerits, T.; Zigmantas, D.\* Understanding radiative transitions and relaxation pathways in plexcitons. *Chem.* **2021**, *7*, 1092-1107.

<https://doi.org/10.1016/j.chempr.2021.02.028>

Flores-Resendiz M.; Lappe-Oliveras P.; **Macías-Rubalcava M.L.\*** Mitochondrial damage produced by phytotoxic chromenone and chromanone derivatives from endophytic fungus *Daldinia eschscholtzii* strain GsE13. *Appl. Microbiol. Biotechnol.* **2021**, *105*, 4225 – 4239.

<https://doi.org/10.1007/s00253-021-11318-7>

Fried, S.D.E.; Lewis, J.W.; Szundi, I.; **Martínez-Mayorga, K.**; Mahalingam, M.; Vogel, R.; Kliger, D.S.; Brown, M.F.\* Membrane curvature revisited—the archetype of Rhodopsin studied by time-resolved electronic spectroscopy. *Biophys. J.* **2021**, *120*, 440-452.

<https://doi.org/10.1016/j.bpj.2020.11.007>

Gálvez-Martínez, E.; Aguilar-Granda, A.; **Rodríguez-Molina, B.**; Haro-Pérez, C.; **Kozina, A.\*** Catalytic evaluation of citrate-stabilized palladium nanoparticles in the Sonogashira reaction for the synthesis of 1,4-Bis[(trimethylsilyl)ethynyl]benzene. *Catal. Commun.* **2021**, 106269.

<https://doi.org/10.1016/j.catcom.2020.106269>

García-Aguilera M.E.; de San Miguel E.R.; Cruz-Pérez J.; Aguirre-Cruz L.; Ramírez-Alfaro C.M.; **Esturau-Escofet N.\*** NMR-based metabolomics of human cerebrospinal fluid identifies signature of brain death. *Metabolomics.* **2021**, *17*, 40.

<https://doi.org/10.1007/s11306-021-01794-3>

**García-González, M.C.**; Espinosa-Rocha, J.; Rodríguez-Cortés, L.A.; Amador-Sánchez, Y.A.; **Miranda, L.D.\***; **Rodríguez-Molina, B.\*** Pairing multicomponent stators with aromatic rotators for new emissive molecular rotors. *Org. Biomol. Chem.* **2021**, *19*, 3404–3412, 2021.

<https://doi.org/10.1039/d1ob00161b>

García-López, J.G.; Gutiérrez-Hernández, A.I.; **Toscano, R.A.**; **Ramírez-Apan, M.T.**; Terrón, J.A.; Ortega-Alfaro, M.C.; **López-Cortés, J.G.\*** Synthesis of new heterocycle-based selenoamides as potent cytotoxic agents. *Arkivoc.* **2021**, 13-24.

<https://doi.org/10.24820/ark.5550190.p011.296>

García-Ramírez, J.; **Miranda-Gutiérrez, L.D.\*** Peroxide-mediated oxidative radical cyclization to the quinazolinone system: Efficient syntheses of Deoxyvasicinone, Mackinazolinone and (±)-Leucomidine C. *Synthesis*. **2021**, 53, 1471-1477.

<https://doi.org/10.1055/s-0040-1705975>

Gijsbers, A; **Sánchez-Puig, N**; Gao, Y.; Peters, P.J.; Ravelli, R.B.G.; Siliqi, D\*. Structural analysis of the partially disordered protein EspK from *Mycobacterium tuberculosis*. *Crystals*. **2021**, 11, 18.

<https://doi.org/10.3390/cryst11010018>

Gómez-Jaimes, G.; Rojas León, I.; Martínez Romero, R.; Beltrán, H.I.\*; **Rodríguez-Molina, B.**; Hiller, W.\*; Jurkschat, K.\*; Hernandez, I.F.; Hopfl, H.\* Dinuclear Organotin Building Blocks and their Conversion into a Tetranuclear Macrocyclic Containing Sn–O–Sn Linkages. *Eur. J. Inorg. Chem.* **2021**, 2148-2162.

<https://doi.org/10.1002/ejic.202100186>

González-Perdomo, P.; González, J.; **Martínez-Otero, D.**; Unnamatla, M.V.B.; García-Eleno, M.A.; Corona-Becerril, D.; Cuevas-Yáñez, E.\* Synthesis of 3-alkyl-1,2,3-triazol-1-ium hydrogen sulphate derivatives. *J. Chem. Res.* **2021**, 45, 322-325.

<https://doi.org/10.1177/1747519820978620>

**Hernández-García, A.** Strategies to build hybrid protein–dna nanostructures. *Nanomaterials*. **2021**, 11, 1332.

<https://doi.org/10.3390/nano11051332>

Hernández-Juárez, C.; Flores-Cruz, R.; **Jiménez-Sánchez, A.\*** Fluorescent probe for early mitochondrial voltage dynamics. *Chem. Commun.* **2021**, 57, 5526-5529.

<https://doi.org/10.1039/d1cc01944a>

Hernández-Romero, D.; Rosete-Luna, S.; López-Monteon, A.; Chávez-Piña, A.; Pérez-Hernández, N.; Marroquín-Flores, J.; Cruz-Navarro, A.; Pesado-Gómez, G.; **Morales-Morales, D.\***; Colorado-Peralta, R.\* First-row transition metal compounds containing benzimidazole ligands: An overview of their anticancer and antitumor activity. *Coord. Chem. Rev.* **2021**, 439, 213930.

<https://doi.org/10.1016/j.ccr.2021.213930>

**Hernández-Vázquez, E.\***; Amador-Sánchez, Y.A.; Cruz-Mendoza, M.A.; **Ramírez-Apan, M.T.**; **Miranda, L.D.\*** Multicomponent synthesis and anti-proliferative screening

of biaryl triazole-containing cyclophanes. *Bioorg. Med. Chem. Lett.* **2021**, 40, 127899.

<https://doi.org/10.1016/j.bmcl.2021.127899>

Jaramillo-Ramirez, J.; Marcial-Bazaldua, N.; **Sánchez-Puig, N.\*** Characterisation of the interaction of guanine nucleotides with ribosomal GTPase Lsg1. *Biochim. Biophys. Acta, Proteins Proteomics*. **2021**, 1869, 140538.

<https://doi.org/10.1016/j.bbapap.2020.140538>

**Jiménez-Estrada, M.\***; Huerta-Reyes, M.; Tavera-Hernandez, R.; Alvarado-Sansininea, J.J.; Alvarez, A. B. Contributions from Mexican Flora for the treatment of *Diabetes mellitus*: Molecules of *Psacalium decompositum* (A. Gray) H. Rob & Brettell. *Molecules*. **2021**, 26, 2892.

<https://doi.org/10.3390/molecules26102892>

Juárez-Rodríguez, M.M.; Cortés-López, H.; García-Contreras, R.; Gonzalez-Pedrajo, B.; Diaz-Guerrero, M.; **Martínez-Vázquez, M.**; **Rivera-Chávez, J.A.**; Soto-Hernández, R.M.; Castillo-Juarez, I.\* Tetradecanoic acids with anti-virulence properties increase the pathogenicity of *Pseudomonas aeruginosa* in a murine cutaneous infection model. *Front. Cell. Infect. Microbiol.* **2021**, 10, 597517.

<https://doi.org/10.3389/fcimb.2020.597517>

Labra-Núñez, A.; Cofas-Vargas, L.F.; Gutiérrez-Magdaleno, G.; Gómez-Velasco, H.; **Rodríguez-Hernández, A.**; **Rodríguez-Romero, A.**; **García-Hernández, E.\*** Energetic and structural effects of the Tanford transition on ligand recognition of bovine  $\beta$ -lactoglobulin. *Arch. Biochem. Biophys.* **2021**, 699, 108750.

<https://doi.org/10.1016/j.abb.2020.108750>

Leite, C.M.\*; de Araujo-Neto, J.H.; Corrêa, R.S.; Colina-Vegas, L.; **Martínez-Otero, D.**; Martins, P.R.; Silva, C.G.; Batista, A.A. On the cytotoxicity of chiral ruthenium complexes containing sulfur amino acids against breast tumor cells (Mda-231 and mcf-7). *Anti-Cancer Agents Med. Chem.* **2021**, 21, 1172-1182.

<https://doi.org/10.2174/1871520620666200824114816>

Linares-Anaya, O.; Avila-Sorrosa, A.; Diaz-Cedillo, F.; Gil-Ruiz, L.A.; Correa-Basurto, J.; Salazar-Mendoza, D.; Orjuela, A.L.; Ali-Torres, J.; **Ramírez-Apan, M.T.**; **Morales-Morales, D.\*** Synthesis, characterization, and preliminary in vitro cytotoxic evaluation of a series of 2-substituted benzo[d][1,3] azoles. *Molecules*. **2021**, 26, 92021, 2780.

<https://doi.org/10.3390/molecules26092780>

López-González, R.C.; Juárez-Campusano, Y.S.; Rodríguez-Chávez, J.L.; **Delgado-Lamas, G.**; Arvizu Medrano, S.M.; Martínez-Peniche, R.A.; Pacheco-Aguilar, J.R. Antagonistic Activity of Bacteria isolated from apple in different fruit development stages against blue mold caused by *Penicillium expansum*. *Plant Pathol. J.* **2021**, *37*, 24-35.

<https://doi.org/10.5423/PPJ.OA.07.2020.0121>

López-López, E.E.; López-Jiménez, S.J.; **Barroso-Flores, J.**; Rodríguez-Cárdenas, E.; Tapia-Tapia, M.; López-Téllez, G.; **Miranda, L.D.\***; **Frontana-Uribe, B.A.\*** Electrochemical reactivity of S-phenacyl-O-ethyl-xanthates in hydroalcoholic (MeOH/H<sub>2</sub>O 4:1) and anhydrous acetonitrile media. *Electrochim. Acta.* **2021**, *380*, 138239.

<https://doi.org/10.1016/j.electacta.2021.138239>

**Madariaga-Mazón, A.\***; Naveja, J.J.; Medina-Franco, J.L.; Noriega-Colima, K.O.; **Martínez-Mayorga, K.\*** DiaNat-DB: a molecular database of antidiabetic compounds from medicinal plants. *RSC Adv.* **2021**, *11*, 5172-5178.

<https://doi.org/10.1039/d0ra10453a>

**Maldonado, E.\***; **Ramírez-Apan, T.**; Martínez, M. Cytotoxic withanolides from *Datura innoxia*. *Z. Naturforsch. C.* **2021**, *76*, 5, 251-255.

<https://doi.org/10.1515/znc-2020-0265>

Marmolejo-Valencia, A.F.; **Madariaga-Mazón, A.**; **Martínez-Mayorga, K.\*** Bias-inducing allosteric binding site in mu-opioid receptor signaling. *SN Appl. Sci.* **2021**, *3*, 566.

<https://doi.org/10.1007/s42452-021-04505-8>

Martínez-Ahumada, E.; Díaz-Ramírez, M.L.; Velásquez-Hernández, M.J.; **Jancik, V.\***; Ibarra, I.A.\* Capture of toxic gases in MOFs: SO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>S, NH<sub>3</sub> and NO<sub>x</sub>. *Chem. Sci.* **2021**, *12*, 6772-6799.

<https://doi.org/10.1039/d1sc01609a>

Martínez-Martínez, D.; Santiago, M.L.; **Toscano, R.A.**; **Amézquita-Valencia, M.\*** Molybdenum (VI) complexes containing pyridylimine ligands: Effect of the imine nitrogen substituent in the epoxidation reaction. *Eur. J. Inorg. Chem.* **2021**, *3*, 243-251.

<https://doi.org/10.1002/ejic.202000790>

Martínez-Zepeda, D.L.; Meza-González, B.; Álvarez-Hernández, M.L.; Bazany-Rodríguez, I.J.; Vilchis Néstor, A.R.; **Cortés-Guzmán, F.**; Gómez-Espinosa, R.M.\*; Valdes-García, J.; **Dorazco-González, A.\*** Efficient naked eye

sensing of tartrate/malate based on a Zn-Xylenol orange complex in water and membrane-based test strips. *Dyes Pigm.* **2021**, *188*, 109239.

<https://doi.org/10.1016/j.dyepig.2021.109239>

Mayorquín-Torres, M.C.; Navarro-Huerta, A.; Maldonado-Domínguez, M.; Flores-Álamo, M.; **Rodríguez-Molina, B.**; Iglesias-Arteaga, M.\* Palladium-catalyzed generation of ortho-quinone methides. a three-component synthesis of l-shaped dimeric steroidal scaffolds. *J. Org. Chem.* **2021**, *86*, 5, 4112-4120.

<https://doi.org/10.1021/acs.joc.0c02943>

Mijangos, M.V.; Amador-Sanchez, Y.A.; **Miranda, L.D.\*** Synthesis of quinoline-4-carboxamides and quinoline-4-carboxylates via a modified Pfitzinger Reaction of N-Vinylisatins. *Eur. J. Org. Chem.* **2021**, *4*, 637-647.

<https://doi.org/10.1002/ejoc.202001455>

Monzón-Gonzalez, C.R.; Sanchez-Vergara, M.E.\*; Narvaez, W.E.V.; **Rocha-Rinza, T.**; **Hernández, M.**; **Gómez, E.**; Jiménez-Sandoval, O.; **Álvarez-Toledano, C.\*** Synthesis and characterization of organotin(IV) semiconductors and their applications in optoelectronics. *J. Phys. Chem. Solids.* **2021**, *150*, 109840.

<https://doi.org/10.1016/j.jpcs.2020.109840>

Navarro-Huerta, A.; Jellen, M.J.; Arcudia, J.; Teat, S.J.; **Toscano, R.A.**; Merino, G.; **Rodríguez-Molina, B.\*** Tailoring the cavities of hydrogen-bonded amphidynamic crystals using weak contacts: Towards faster molecular machines. *Chem. Sci.* **2021**, *12*, 2181-2188.

<https://doi.org/10.1039/d0sc05899h>

Naveja, J.J.; **Madariaga-Mazón, A.**; Flores-Murrieta, F.; Granados-Montiel, J.; Maradiaga-Ceceña, M.; Alaniz, V.D.; Maldonado-Rodríguez, M.; García-Morales, J.; Senosiain-Peláez, J.P.; **Martínez-Mayorga, K.** Union is strength: antiviral and anti-inflammatory drugs for COVID-19. *Drug Discovery Today.* **2021**, *26*, 229-239.

<https://doi.org/10.1016/j.drudis.2020.10.018>

Nieves, E.; Vite, G.; **Kozina, A.**; Olguin, L.F.\* Ultrasound-assisted production and optimization of mini-emulsions in a microfluidic chip in continuous-flow. *Ultrason. Sonochem.* **2021**, *74*, 105556.

<https://doi.org/10.1016/j.ultsonch.2021.105556>

Núñez-Mojica, G.; Vazquez-Ramirez, A.L.; García, A.; Rivas-

Galindo, V.M.; Garza-Gonzalez, E.; **Cuevas González-Bravo, G.E.**; **Toscano, R.A.**; Moo-Puc, R.E.; Villanueva-Toledo, J.R.; Marchand, P.; Camacho-Corona, M.D.R.\* New cyclolignans of *Larrea tridentata* and their antibacterial and cytotoxic activities. *Phytochem. Lett.* **2021**, *43*, 212 – 218.

<https://doi.org/10.1016/j.phytol.2021.04.013>

Núñez-Mojica, G.; Rivas-Galindo, V.M.; Garza-González, E.; **Miranda, L.D.**; Romo-Pérez, A.; Pagniez, F.; Picot, C.; Le Pape, P.; Bazin, M.A.; Marchand, P.\*; Camacho-Corona, M.R. Antimicrobial and antileishmanial activities of extracts and some constituents from the leaves of *Solanum chrysotrichum* Schldl. *Med. Chem.* **2021**, *30*, 152-162.

<https://doi.org/10.1007/s00044-020-02648-8>

Obregón-Mendoza, M.A.; Arias-Olguín, I.I.; Meza-Morales, W.; Álvarez-Ricardo, Y.; **Chávez, M.I.**; **Toscano, R.A.**; Cassani, J.; **Enriquez, R.G.**\* Expected and unexpected products in half curcuminoid synthesis: Crystal structures of but-3-en-2-ones and 3-methylcyclohex-2-enones. *Crystals.* **2021**, *11*, 404.

<https://doi.org/10.3390/cryst11040404>

Ocaña-Rios, I.; Ruiz-Terán, F.; Garcia-Aguilera, M.E.; Tovar-Osorio, K.; Rodríguez De San Miguel, E.; **Esturau-Escofet, N.**\* Comparison of two sample preparation methods for H1-NMR wine profiling: Direct analysis and solid-phase extraction. *Vitis.* **2021**, *60*, 69-75.

<https://doi.org/10.5073/vitis.2021.60.69-75>

Porras-Ramírez, J.; Estrada-Reyes, R.; Rodríguez-Zavala, J.S.; Dorantes-Barron, A.M.; Jurado-Hernandez, N.; **Martínez-Vázquez, M.**\* Antidepressant-like effects of a new dihydro isoquinoline and its chemical precursors in mice: Involvement of serotonin and dopaminergic systems. *Can. J. Chem.* **2021**, *99*, 455–464.

<https://doi.org/10.1139/cjc-2020-0291>

Ramírez-Nava, E.J.; Hernández-Ochoa, B.; Navarrete-Vázquez, G.; **Arreguín-Espinosa, R.**; Ortega-Cuellar, D.; González-Valdez, A.; Martínez-Rosas, V.; Morales-Luna, L.; Martínez-Miranda, J.; Sierra-Palacios, E.; Rocha-Ramírez, L.M.; De Franceschi, L.; Marcial-Quino, J.\*; Gómez-Manzo, S.\* Novel inhibitors of human glucose-6-phosphate dehydrogenase (HsG6PD) affect the activity and stability of the protein. *Biochim. Biophys. Acta, Gen. Subj.* **2021**, *1865*, 129828.

<https://doi.org/10.1016/j.bbagen.2020.129828>

Reina, M.; Hernández-Ayala, L.F.; Bravo-Gómez, M.E.; **Gómez, V.**; Ruiz-Azuara, L. Second generation of Casiopeinas: A joint

experimental and theoretical study. *Inorg. Chimica Acta* **2021**, *517*, 120201.

<https://doi.org/10.1016/j.ica.2020.120201>

**Reyes-Chilpa, R.**; Guzmán-Gutiérrez, S.L.; Campos-Lara, M.; Bejar, E.; Osuna-Fernández, H.R.; Hernández-Pasteur, G. On the first book of medicinal plants written in the American Continent: The Libelius Medicinalibus Indorum Herbis from Mexico, 1552. A review. *Bol. Latinoam. Caribe Plant. Med. Aromat.* **2021**, *20*, 1-27.

<https://doi.org/10.37360/blacpma.21.20.1.1>

Rincón-Londoño, N.; Garza, C.; **Esturau-Escofet, N.**; **Kozina, A.**; Castillo, R.\* Selective incorporation of one of the isomers of a photoswitchable molecule in wormlike micelles. *Colloids Surf. A.* **2021**, *610*, 125903.

<https://doi.org/10.1016/j.colsurfa.2020.125903>

Ríos-Malvaez, Z.G.; Cano-Herrera, M.A.; Dávila-Becerril, J.C.; Mondragón-Solorzano, G.; **Ramírez-Apan, M.T.**; **Morales-Morales, D.**; **Barroso-Flores, J.**; Santillán-Benítez, J.G.; Unnamatla, M.V.B.; García-Eleno, M.A.; González-Rivas, N.; Cuevas-Yáñez, E.\* Synthesis, characterization and cytotoxic activity evaluation of 4-(1,2,3-triazol-1-yl) salicylic acid derivatives. *J. Mol. Struct.* **2021**, *1225*, 129149.

<https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2020.129149>

Rosales-Amezcuca, S.C.; Ballinas-Indili, R.; López-Reyes, M.E.; Rosas-Castañeda, H.A.; Toscano, R.A.; Álvarez-Toledano, C.\* Synthesis of novel isoxazoline and isoxazolidine derivatives: Carboxylic acids and delta bicyclic lactones via the nucleophilic addition of bis(trimethylsilyl) ketene acetals to isoxazoles. *Arkivoc.* **2021**, 197-209.

<https://doi.org/10.24820/ARK.5550190.P011.500>

Rosales-Vázquez, L.D.; **Dorazco-González, A.\***; Sánchez-Mendieta, V.\* Efficient chemosensors for toxic pollutants based on photoluminescent Zn(ii) and Cd(ii) metal-organic networks. *Dalton Trans.* **2021**, *50*, 4470-4485.

<https://doi.org/10.1039/d0dt04403b>

Rosas-Jiménez, J.G.; García-Revilla, M.A.; **Madariaga-Mazón, A.**; **Martínez-Mayorga, K.\*** Predictive global models of Cruzain Inhibitors with large chemical coverage. *ACS Omega.* **2021**, *6*, 10, 6722–6735.

<https://doi.org/10.1021/acsomega.0c05645>

**Rufino-Felipe, E.**; Colorado-Peralta, R.; Reyes-Márquez, V.; Valdés, H.; **Morales-Morales, D.** Fluorinated-NHC

transition metal complexes: Leading characters as potential anticancer metallodrugs. *Anti-Cancer Agents Med. Chem.* **2021**, *21*, 938-948.

<https://doi.org/10.2174/1871520620666200908103452>

Rufino-Felipe, E.; Osorio-Yáñez, R.N.; Vera, M.; Valdés, H.; González-Sebastián, L.; Reyes-Sánchez, A.; **Morales-Morales, D.\*** Transition-metal complexes bearing chelating NHC ligands. catalytic activity in cross coupling reactions via C–H activation. *Polyhedron.* **2021**, *2041*, 115220.

<https://doi.org/10.1016/j.poly.2021.115220>

Ruiz-Blanco, Y.B.; Ávila-Barrientos, L.P.; Hernández-García, E.; Antunes, A.; Agüero-Chapin, G.\*; **García-Hernández, E.** Engineering protein fragments via evolutionary and protein–protein interaction algorithms: de novo design of peptide inhibitors for F<sub>0</sub>F<sub>1</sub>-ATP synthase. *FEBS Lett.* **2021**, *595*, 183-194.

<https://doi.org/10.1002/1873-3468.13988>

Salas-Oropeza J.; **Jiménez-Estrada M.**; Pérez-Torres A.; Castell-Rodríguez A.E.; Becerril-Millán R.; Rodríguez-Monroy M.A.; Jarquín-Yáñez K.; Canales-Martínez M.M. Wound healing activity of  $\alpha$ -pinene and  $\alpha$ -phellandrene. *Molecules.* **2021**, *26*, 2488.

<https://doi.org/10.3390/molecules26092488>

Sánchez-Pacheco, A.D.; Hernández-Vergara, M.; Jaime-Adán, E.; **Hernández-Ortega, S.**; **Valdés-Martínez, J.\*** Schiff bases as possible hydrogen bond donors and acceptors. *J. Mol. Struct.* **2021**, *1234*, 130136.

<https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2021.130136>

**Sánchez-Puig, N.\***; Cuéllar-Cruz, M.; Islas, S.R.; Tapia-Vieyra, J.V.; **Arreguín-Espinosa, R.A.**; **Moreno, A.\*** The influence of silicateins on the shape and crystalline habit of silica carbonate biomorphs of alkaline earth metals (Ca, Ba, Sr). *Crystals.* **2021**, *11*, 438.

<https://doi.org/10.3390/cryst11040438>

Sánchez-Vergara, M.E.\*; Hamui, L.; **Gómez, E.**; Chans, G.M.; Galván-Hidalgo, J.M. Design of promising heptacoordinated organotin (IV) complexes-pedot: Pss-based composite for new-generation optoelectronic devices application. *Polymers.* **2021**, *13*, 1023.

<https://doi.org/10.3390/polym13071023>

Sarmiento-Pavia, P.D.; **Rodríguez-Hernández, A.**; **Rodríguez-Romero, A.**; Sosa-Torres, Martha E. The structure of a novel membrane-associated 6-phosphogluconate dehydrogenase from *Gluconacetobacter diazotrophicus*

(Gd6PGD) reveals a subfamily of short-chain 6PGDs. *FEBS J.* **2021**, *288*, 4, 1286-1304.

<https://doi.org/10.1111/febs.15472>

Thompson, D.C.\*; **Anderson, J.S.M.**; Sen, K.D. Information theory and Wigner crystallization: A model perspective. *Int. J. Quantum Chem.* **2021**, *121*, e26549.

<https://doi.org/10.1002/qua.26549>

Torres-Gomez, N.; García-Gutiérrez, D.F.; Lara-Canche, A.R.; **Triana-Cruz, L.**; Arizpe-Zapata, J. A.; García-Gutiérrez, I.D. Absorption and emission in the visible range by ultra-small PbS quantum dots in the strong quantum confinement regime with S-terminated surfaces capped with diphenylphosphine. *J. Alloys. Compd.* **2021**, *860*, 158443.

<https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2020.158443>

Valdez-Cruz, N.A.; **García-Hernández, E.**; Espitia, C.; Cobos-Marín, L.; Altamirano, C.; Bando-Campos, C.G.; Cofas-Vargas, L.F.; Coronado-Aceves, E.W.; González-Hernández, R.A.; Hernández-Peralta, P.; Juárez-Lopez, D.; Ortega-Portilla, P.A.; Restrepo-Pineda, S.; Zelada-Cordero, P.; Trujillo-Roldan, M.A.\* Integrative overview of antibodies against SARS-CoV-2 and their possible applications in COVID-19 prophylaxis and treatment. *Microb. Cell. Fact.* **2021**, *20*, 88.

<https://doi.org/10.1186/s12934-021-01576-5>

Valencia-Loza, S.D.J.; Lopez-Olvera, A.; Martinez-Ahumada, E.; **Martínez-Otero, D.**; Ibarra, I.A.\*; Jancik V.; **Guzmán-Percastegui, E.\*** SO<sub>2</sub> Capture and Oxidation in a Pd<sub>6</sub>L<sub>8</sub> Metal-Organic Cage. *ACS Appl. Mater. Interfaces.* **2021**, *13*, 16, 18658–18665.

<https://doi.org/10.1021/acsami.1c00408>

Vázquez-Hernández, G.A.; Delgado-Cruz, R.; Sánchez-Vergara, M.E.; Fomina, L.; **Gómez-Vidales, V.**; de la Mora, B.; Acosta, A.; Ríos, C.; Salcedo, R.\* New 2, 5-aromatic disubstituted pyrroles, prepared using diazonium salts procedures. *J. Mol. Struct.* **2021**, *1233*, 130107.

<https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2021.130107>

Villatoro, E.; Muñoz-Rugeles, L.; Durán-Hernández, J.; Salcido-Santacruz, B.; **Esturau-Escofet, N.**; **López-Cortes, J.G.**; Ortega-Alfaro, M.C.; **Peón, J.\*** Two-photon induced isomerization through a cyaninic molecular antenna in azo compounds. *Chem. Commun.* **2021**, *57*, 3123-3126.

<https://doi.org/10.1039/d0cc08346a>

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

Datos consultados en la base de datos *Web of Science*.

Volume 45  
Number 23  
21 June 2021  
Pages 10121-10550

# NJC

New Journal of Chemistry  
rsc.li/njc

A journal for new directions in chemistry

## Non-Symmetric POCOP Pincer Compounds

Non-symétriques POCOP Pincer Compounds

#Hecho En CU

ISSN 1144-0546

**ROYAL SOCIETY OF CHEMISTRY**

**PAPER**  
Lucero González-Sebastián, David Morales-Morales *et al.*  
Novel *meta*-benzothiazole and benzimidazole functionalised POCOP-Ni(ii) pincer complexes as efficient catalysts in the production of diarylketones

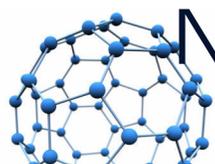
**rnrs**

**Portada:**

Novel *meta*-benzothiazole and benzimidazole functionalised POCOP-Ni(ii) pincer complexes as efficient catalysts in the production of diarylketones” es portada de la revista NJC (*New Journal of Chemistry*).

**Autores:** Antonio A. Castillo-García, Lucero González-Sebastián, Leticia Lomas-Romero, Simón Hernández-Ortega, Rubén A. Toscano y David Morales-Morales\*.

Vínculo: <https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2021/nj/d1nj01348c#!divAbstract>



# NUEVAS CONTRATACIONES



**Dr. Daniel Finkelstein-Shapiro**

Investigador de Tiempo Completo  
Departamento de Físicoquímica  
Fecha de ingreso: 1° de noviembre de 2020.

## Resumen Académico

El Dr. Finkelstein-Shapiro obtuvo su licenciatura en Física por la Universidad de Cornell, EUA, especializándose en el tema de físicas de bajas temperaturas. Obtuvo su doctorado en Química en la Universidad de Northwestern, EUA, estudiando la transferencia de carga interfacial en fotocatalizadores. Posteriormente, realizó un postdoctorado conjunto entre Arizona State University y Université Pierre et Marie Curie como parte de la beca "Research in Paris", combinando estudios teóricos de Hamiltonianos de espectro discreto-continuo en medios disipativos con el estudio de nanopartículas fotocatalíticas por medio de métodos de resonancia magnética. Completó su formación con una segunda estancia postdoctoral, auspiciada por las becas Wenner-Gren y Marie-Sklodowska-Curie en la Universidad de Lund, Suecia, centrándose en la dinámica ultrarápida de estados polaritónicos en nanopartículas plasmónicas mediante la espectroscopía coherente bidimensional y la teoría de sistemas cuánticos abiertos. A finales del 2020 se incorpora como investigador en el Departamento de Físicoquímica del IQ, UNAM. Su meta es plasmar efectos de Física Atómica en sistemas moleculares y de nanopartículas para aprovechar estos efectos en el diseño de mejores fotocatalizadores.

## Líneas de investigación

Diseño y síntesis de nanopartículas funcionalizadas para fotoquímica. Utilización de fenómenos de óptica cuántica (estados polaritónicos, interferencias de Fano).

Caracterización de nanomateriales mediante técnicas de resonancia magnética (RMN de líquidos, RMN de sólidos, EPR) y vibracionales (IR, Raman).

Descripción teórica de la evolución de estados fotoexcitados en nanopartículas funcionalizadas mediante modelos juguete, descripción teórica de espectroscopías multidimensionales (luz clásica y no-clásica).



**Dra. Danaí Montalván Sorrosa**

Investigadora de Tiempo Completo  
Departamento de Química de Biomacromoléculas  
Fecha de ingreso: 16 de abril de 2021.

## Resumen Académico

La Dra. Montalván Sorrosa es Química Bacterióloga y Parasitóloga, egresada de la Escuela Nacional de Ciencias Biológicas del Instituto Politécnico Nacional. Obtuvo el doctorado en Ciencias Biomédicas (2016) trabajando en el Instituto de Fisiología Celular y en el Instituto de Física de la Universidad Nacional Autónoma de México, bajo la dirección del Dr. Rolando Castillo Caballero y del Dr. Jaime Mas Oliva. En esta etapa, utilizó virus filamentosos formadores de cristales líquidos para desarrollar bionanomateriales y estudiar las propiedades reológicas de este fluido complejo. Utilizó espectroscopía Raman (Surface-Enhanced Raman Spectroscopy) como un método de análisis para muestras biológicas y de diagnóstico clínico. Además, participó en el estudio del autoensamblaje de péptidos cortos en estructuras de tipo amiloide. Realizó una estancia postdoctoral en el grupo del Prof. Vinodhan Manoharan, en la Harvard John A. Paulson School of Engineering and Applied Sciences (2017-2021), en donde aplicó el autoensamblaje de sistemas coloidales mediado por ADN para el desarrollo de células artificiales. Entre sus proyectos principales se encuentran el desarrollo de células artificiales fotosintéticas, el estudio del autoensamblaje de coloides a través de transiciones de fase de cristales líquidos o cadenas de ADN y el diseño y producción de dispositivos microfluídicos.

## Líneas de investigación

Las principales líneas de investigación del Laboratorio de Sistemas Bioinspirados son:

Desarrollo de células artificiales.

Autoensamblaje de sistemas coloidales mediante DNA.

Espectroscopía Raman para diagnóstico clínico.

Biosensores basados en DNA.

Cristales líquidos virales en el ambiente y en procesos patológicos.

Autoensamblaje y dinámica de coloides en cristales líquidos.

# ARTÍCULO DESTACADO

## Dimeric phenalenones from *Talaromyces* sp. (IQ-313) inhibit hPTP1B<sub>1-400</sub>: Insights into mechanistic kinetics from *in vitro* and *in silico* studies

Dr. Arturo Jiménez-Sánchez/ Departamento de Química Orgánica, Instituto de Química – UNAM.

Se ha documentado que en la actualidad, alrededor del 70% de las muertes en todo el mundo son causadas por enfermedades de carácter crónico, siendo las enfermedades cardiovasculares, el cáncer, enfermedades respiratorias y diabetes mellitus las más frecuentes, en ese orden. De manera interesante, un proceso químico que está involucrado en el desarrollo y progreso de dichos padecimientos es la fosforilación reversible de proteínas, proceso que se regula por las proteínas tirosina quinasa (PTKs) y las proteínas tirosina fosfatasa (PTPs).

En el Instituto de Química de la UNAM, el grupo de investigación a cargo del Dr. José Rivera Chávez, adscrito al Departamento de Productos Naturales, enfoca sus esfuerzos en el descubrimiento de moduladores alostéricos de origen natural de la PTP1B, un miembro de la familia de las PTPs. El sitio alostérico en PTP1B se encuentra 20 Å fuera del sitio catalítico de la enzima y puede modular o disminuir la actividad de dicha fosfatasa.<sup>1</sup> El grupo del Dr. Rivera Chávez describió en la revista *Bioorganic Chemistry*<sup>2</sup> la sobreexpresión de una PTP1B humana en *Escherichia coli*, con la cual realizaron diversos ensayos enzimáticos mediante espectrofotometría para evaluar así las moléculas inhibitoras de la proteína. Adicionalmente, prepararon los extractos de diversos hongos asociados a una colonia de hormigas y evaluaron su actividad *in vitro* contra la PTP1B humana (*h*PTP1B<sub>1-400</sub>). Debido a su alto potencial inhibitorio, el extracto de la especie *Talaromyces* sp., fue seleccionado para su estudio químico. Dicho estudio permitió el aislamiento de cuatro dímeros de fenalenona: la duclauxina, la talaromicesona B, la xenoclauxina y la bacillisporina G. De manera adicional, a partir de un extracto de origen vegetal se logró el aislamiento del ácido ursólico.

Es importante destacar que el grupo del Dr. Rivera Chávez logró demostrar, con ayuda de estudios de dicroísmo circular, espectrofotometría y acoplamiento y dinámica molecular, que tanto el ácido ursólico como la duclauxina muestran una alta afinidad de unión a la *h*PTP1B<sub>1-400</sub>, y que esta unión es en un sitio diferente al sitio catalítico, apuntando que estos metabolitos secundarios inducen cambios conformacionales en la proteína, los cuales afectan directamente su actividad, sugiriendo que estos compuestos son moduladores alostéricos de la *h*PTP1B<sub>1-400</sub>.

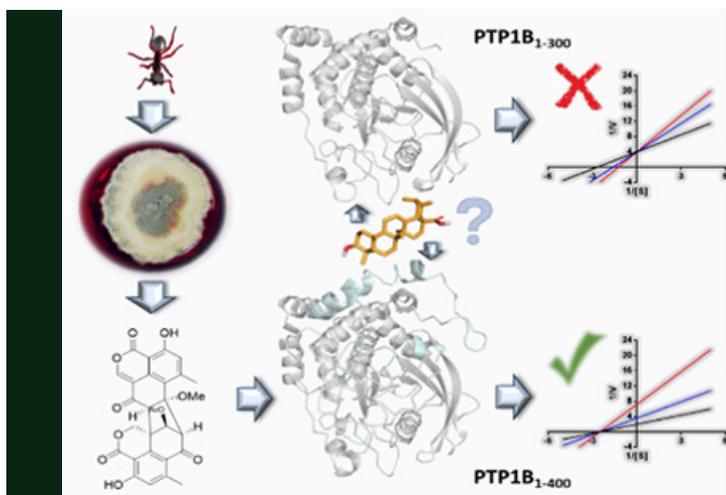


Figura del artículo.

El aislamiento de productos naturales utilizando novedosas técnicas analíticas dereplicativas, así como la sobreexpresión de cantidades importantes de dichas moléculas, ha atraído un gran interés en la comunidad científica, debido a su utilidad en el descubrimiento de productos naturales y al fuerte impacto que tienen en la metabolómica de plantas y microorganismos proveyendo una rápida identificación de compuestos químicos de interés en mezclas altamente complejas utilizando relativamente pocas cantidades de crudo.

La investigación de este tipo de procesos bioquímicos de fosforilación-desfosforilación utilizando proteínas o péptidos naturales es necesariamente de carácter interdisciplinario, involucrando, por ejemplo la construcción de vías de señalización ortogonales, la localización espacial de proteínas en células o el marcaje selectivo de membranas subcelulares.<sup>3</sup> De esta manera, las aplicaciones previamente visualizadas para introducir procesos dinámicos en proteínas diseñadas y manipuladas aumentando sus funciones en las células vivas y agregar funcionalidad a las protocélulas es ya una realidad.

(1) Zargari, F.; Lotfi, M.; Shahraki, O.; Nikfarjam, Z.; Shahraki, J. Flavonoids as potent allosteric inhibitors of protein tyrosine phosphatase 1B: molecular dynamics simulation and free energy calculation, *J. Biomol. Struct. Dyn.* **2018**, 36, 4126–4142. <https://doi.org/10.1080/07391102.2017.1409651>

(2) Jiménez-Arreola, B. S.; Aguilar-Ramírez, E.; Cano-Sánchez, P.; Morales-Jiménez, J.; González-Andrade, M.; Medina-Franco, J. L.; Rivera-Chávez, J. Dimeric phenalenones from *Talaromyces* sp. (IQ-313) inhibit hPTP1B<sub>1-400</sub>: Insights into mechanistic kinetics from *in vitro* and *in silico* studies. *Bioorg. Chem.* **2020**, 101, 103893. DOI: 10.1016/j.bioorg.2020.103893

(3) Harrington, L.; Fletcher, J. M.; Heermann, T. et al. De novo design of a reversible phosphorylation-dependent switch for membrane targeting. *Nat Commun.* **2021**, 12, 1472. <https://doi.org/10.1038/s41467-021-21622-5>

# Ceremonia de inauguración del 80 Aniversario del IQ-UNAM

Dra. Annia Rodríguez Hernández y Dr. Fernando Cortés Guzmán



Imagen: de la presentación del Dr. Jorge Peón Peralta (Director del Instituto de Química de la UNAM) en la ceremonia de inauguración, vía Zoom.

Con una ceremonia que se llevó a cabo de manera virtual, comenzaron los festejos por el 80 Aniversario del Instituto de Química, fundado el 5 de abril de 1941.

El evento fue presidido por el Dr. Enrique Graue Wiechers, Rector de la UNAM, con la presencia del Dr. William Lee Alardín, Coordinador de la Investigación Científica de la UNAM; el Dr. Jorge Peón Peralta, Director del Instituto de Química y la Q. Bertha Guadalupe Rodríguez Sámano, Secretaria General de la AAPAUNAM. Además de distinguidos universitarios como el Dr. Félix Recillas Targa, Director del IFC-UNAM; ex directores del Instituto de Química, el Dr. Raymundo Cea Olivares y el Dr. Gabriel Eduardo Cuevas González Bravo; así como el Dr. Alfonso Romo de Vivar, Investigador Emérito del Instituto, investigadores, académicos, personal y alumnos.

Este magno evento dio inicio con la presentación de un video en donde algunos investigadores, técnicos académicos y alumnos tuvieron la oportunidad de describir, de manera puntual y emotiva, sus experiencias dentro del Instituto. Escuchamos parte de la historia, desde su fundación, hasta las importantes contribuciones de investigación y los beneficios proporcionados a los sectores industrial y de salud, a la Academia y a la población de México

en general. A través de estos relatos, aprendimos que el proyecto del Instituto fue visualizado por el economista Daniel Cosío Villegas y el diplomático Alfonso Reyes Ochoa, quienes pretendieron crear una entidad con la capacidad de impulsar la economía y el desarrollo de la industria en México.

Desde la fundación del Instituto de Química hace 80 años se destacan distintas aportaciones a la sociedad y a la ciencia, tales como el estudio y caracterización de más de 5000 productos naturales provenientes de plantas endémicas de México, la síntesis de la 19-Noretisterona (el primer anticonceptivo oral) sintetizado por parte del Dr. Luis Miramontes; el estudio y compleción del esquema de la biogénesis de los terpenos y el amplio estudio de diterpenoides provenientes principalmente de plantas de *Salvia*. Además, al Instituto de Química se le considera uno de los primeros sitios en desarrollar síntesis de compuestos organometálicos con aplicaciones en catálisis, por lo cual ha ganado premios nacionales en Química.

Es notorio que el Instituto cuenta con especialistas en varias áreas de la Química englobadas en los departamentos de Productos Naturales, Química Orgánica, Química Inorgánica, Química de Biomacromoléculas y Fisicoquímica y de las contribuciones de los grupos de investigación que cada área, han repercutido en ámbitos económico-sociales.



Fotos: (1) Dr. Fernando Walls † (Ex Director del IQ-UNAM), (2) Dr. Fernando Orozco † (Ex Director del IQ-UNAM), (3) Dr. Antonio Madinaveitia † (Fundador del IQ-UNAM), (4) Dr. Jacobo Gómez Lara † (Investigador Emérito del IQ-UNAM), (5) Premiación, (6) Dr. Barbarín Arreguín Lozano † (Investigador Emérito del IQ-UNAM).



Dr. Barbarín Arreguín Lozano †  
(Investigador Emérito del IQ-UNAM).

En la actualidad el Instituto de Química, destaca por el uso de técnicas y procesos de vanguardia. Cuenta con dos Laboratorios Nacionales y un Laboratorio Universitario, los cuales están especializados en las áreas de estructura de macromoléculas utilizando la técnica de difracción de rayos X en el LANEM; en la determinación de los compuestos provenientes de materiales históricos utilizando técnicas espectroscópicas, espectrométricas y de cromatografía en el LANCIC y en el estudio de la materia por resonancia magnética nuclear en el LURMN.

En fechas recientes el Instituto de Química apoyado por la Secretaría de Vinculación, se ha dado a la tarea de coordinar actividades de colaboración con otras instituciones, tanto académicas como industriales; por ejemplo, el vínculo directo con las escuelas de educación media y superior para atraer y motivar a los alumnos interesados en el área química. Es un orgullo poder decir que en las instalaciones del Instituto de Química se forman los próximos investigadores e investigadoras del país.

El Dr. Jorge Peón Peralta, además de dar una cálida bienvenida a todos los presentes, agradeció a los involucrados en la organización del evento. Asimismo, ensalzó las actividades de los investigadores y académicos durante los años en que el Instituto ha

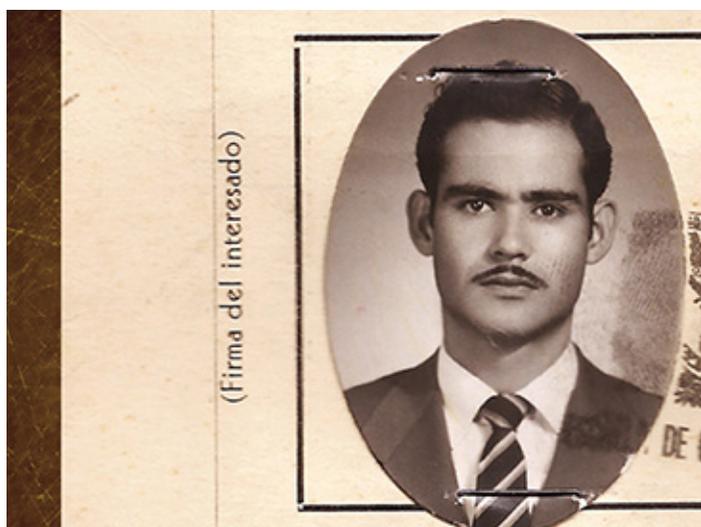
existido y se enfocó en hacer notar la formación de recursos humanos, la producción de artículos científicos y la contratación de jóvenes investigadores en años más recientes. También, describió algunas de las nuevas direcciones que se pretenden tomar en el Instituto para seguir produciendo tecnologías en beneficio del país.

El director habló de los lazos que existen entre el CCIQS UAEM-UNAM y el Instituto de Química, los cuales se consideran dos de los centros de investigación en el área química más importantes del país. Además, se mencionaron algunos de los eventos que se realizarán durante este año para seguir festejando el 80 aniversario.

Durante la ceremonia se realizaron dos emotivos homenajes a investigadores eméritos del Instituto, el Dr. Alfonso Romo de Vivar quien cuenta con una amplia trayectoria en el área de productos naturales y el finado Dr. Barbarín Arreguín Lozano conocido por su amplia y reconocida carrera en el estudio de enzimas y proteínas relacionadas con la biosíntesis y degradación de carbohidratos en células. El Dr. Guillermo Delgado Lamas (Jefe del Departamento de Productos Naturales) presentó en video la trayectoria del Dr. Romo de Vivar y después de esto tomó la palabra el investigador emérito.



Presentación del Dr. Alfonso Romo de Vivar Investigador Emérito del Instituto de Química.



Credencial del Dr. Alfonso Romo de Vivar (1956).



Dr. Félix Recillas Targa, Director del Instituto de Fisiología Celular de la UNAM.

Posteriormente, tomó la palabra el Coordinador de la Investigación Científica, el Dr. William Lee Alardín, quien saludó a los presentes, felicitó a los organizadores del evento y se dirigió a toda la comunidad del Instituto de Química para agradecerles su trabajo y compromiso en mantener funcionando a la entidad durante estos 80 años. Reconoció el crecimiento del Instituto de Química en los últimos años y resaltó el empeño para desarrollar proyectos y servicios encaminados a resolver problemas específicos de la actual pandemia. También, elogió eventos organizados recientemente, como las jornadas de verano con jóvenes alumnos, la participación de investigadores en el *Berkeley Global Science* en colaboración con laboratorios internacionales, destacando sus trabajos de investigación y creando redes laborales. Por último, mencionó la *Feria de Vinculación* para el traspaso de la tecnología a la industria, lo cual permite poner al servicio de la sociedad el conocimiento generado en el IQ.



Dr. William Lee Alardín, Coordinador de la Investigación Científica de la UNAM.



Panel de la sala de Zoom de los invitados a la ceremonia virtual.

Para finalizar el evento, se le dio la palabra al Dr. Enrique Graue Wiechers, quien felicitó a los organizadores del evento y lamentó la pérdida del Dr. Barbarín Arreguín Lozano. El Rector exhortó a enorgullecerse por los 80 años del Instituto, los cuales considera han representado un papel central en el desarrollo tecnológico del país.

El Dr. Graue mencionó los estudios realizados en el IQ para la síntesis industrial de antidetonantes; el desarrollo de combustibles fósiles, habló también de los estudios sobre salinidad del lago de Texcoco, que dio origen a Sosa Texcoco, una importante empresa mexicana. Reconoció la revolución social creada a partir de la síntesis del anticonceptivo oral, la cual, en sus propias palabras, "inició la gran liberación de las mujeres" y habló sobre el fortalecimiento del sentido de igualdad de género con la contratación del 70% de personal femenino en este año. Distinguió a la institución por la formación de recursos humanos con educación de calidad y dio el ejemplo del Premio Nobel de Química, el Dr. Mario Molina †, quien realizó su tesis de licenciatura en el Instituto de Química. Asimismo, exhortó a seguir atrayendo jóvenes alumnos, quienes representan el futuro del país. Finalmente, expresó sus felicitaciones a la comunidad del Instituto de Química por su 80 aniversario.



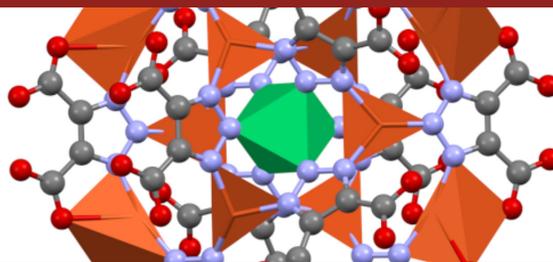
Dr. Mario Molina † (Premio Nobel de Química 1995).



Dr. Enrique Graue Wiechers, Rector de la UNAM.

# 3rd LACA School

Small Molecule Crystallography – Virtual Edition



## Closing Ceremony and Farewell Toast



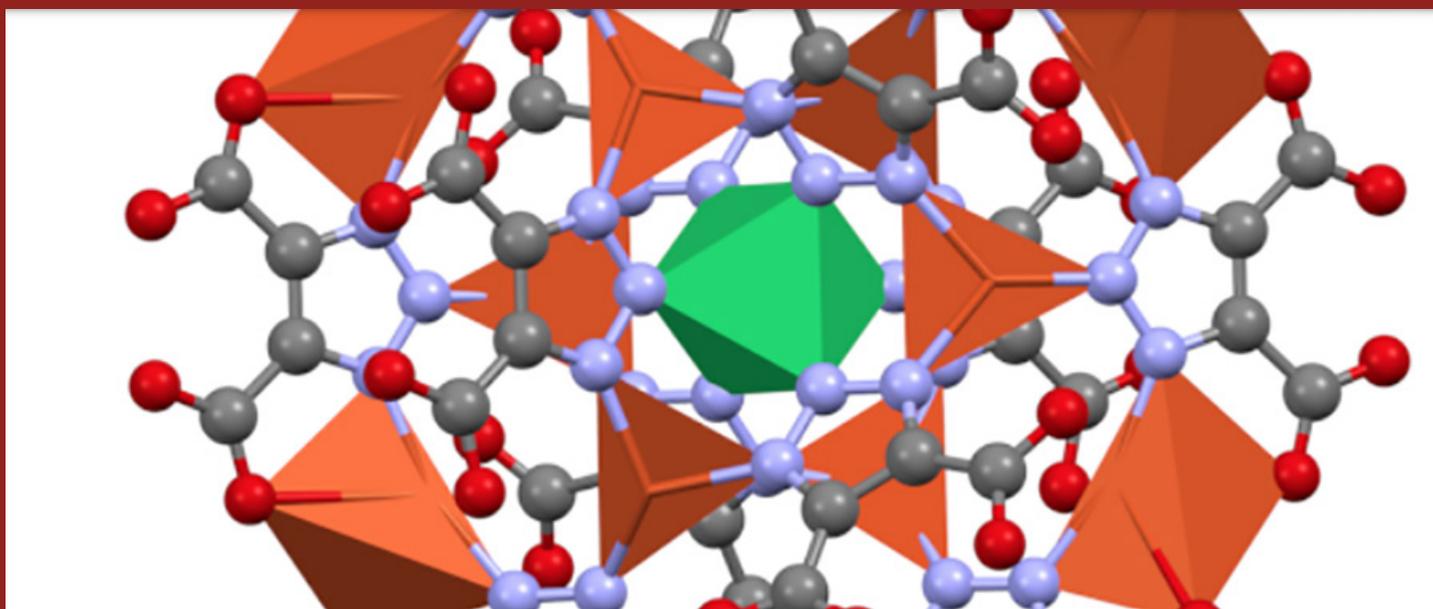
CCIQS  
UAEM-UNAM



# 3<sup>rd</sup> LACA School on Small Molecule Crystallography Virtual Edition

**Del 23 al 27 de noviembre y del 7 al 11 de diciembre**

Dr. Vojtech Jancik y Dr. Diego Martínez Otero



La tercera escuela de la Asociación Latinoamericana de Cristalografía enfocada en Cristalografía de Moléculas Pequeñas, se programó originalmente para realizarse del 23 al 29 de marzo de 2020 en la Ciudad Universitaria de la UNAM en Ciudad de México. Nuestro país fue seleccionado como sede por su ubicación geográfica, por la cercanía con países centroamericanos que no tuvieron la oportunidad de asistir a la primera edición de la Escuela (realizada en 2018 en Montevideo, Uruguay) debido a los elevados costos de viaje. Gracias al apoyo de los patrocinadores que favorecieron la edición presencial: UNAM, IUCr, Bruker, Molecular Dimensions/Anatrace, Mitegen, MBraun y la CCDC, la organización de la escuela estaba concluida, incluidos los menús del almuerzo, sin embargo, diez días antes del inicio del evento, la Universidad emitió una directiva cancelando todos los encuentros, talleres, colegios, etc. y poco después todas las actividades presenciales en su campus. Además, la suspensión de los viajes aéreos, junto con la propagación de la pandemia COVID-19 en América Latina y la situación de salud no dio otra opción más que cancelar la Escuela como estaba planeada.

Esto fue un evento desafortunado y provocó una lucha para cancelar o posponer reservas de hotel, boletos de avión y otros servicios.

*Por primera vez el evento contó con la participación de un representante de género, la M. en C. Ed. Hortensia Segura Silva (Gender Balance Oficial) del Instituto de Química de la Universidad Nacional Autónoma de México, como parte del Comité Organizador.*

Nuestro más sincero agradecimiento para la contadora Araceli Vázquez. Nuestro más sincero agradecimiento para la contadora Araceli Vázquez y su equipo, a la Secretaría Administrativa y a Marcela Guadarrama Aguillar, por su invaluable apoyo en estas actividades. Con el tiempo, la situación no mejoraba y las restricciones establecidas por las autoridades se ampliaban por lo que un evento presencial no tomaría lugar pronto y ciertamente no en 2020. Por lo tanto, fue necesario realizar la Escuela como un evento virtual.

Esta decisión llevó a varios retos, uno de ellos fue que los participantes asistieron a las sesiones virtuales desde países con al menos cuatro diferentes zonas horarias. Además, el evento virtual no pudo cubrir el horario inicialmente planeado de sesenta horas de cursos y ejercicios. También, el seguimiento de la sesión práctica sería más difícil sin acceso directo a las computadoras de los participantes. Por lo tanto, la duración de la escuela se fijó en dos semanas, con una conferencia teórica de hora y media y dos sesiones prácticas de 1 hora por día, distribuidos en ocho horas. Esto permitió que cada conferencia teórica fuera seguida de una sesión práctica el mismo día y otra sesión práctica al día siguiente antes de una nueva conferencia con un tema diferente. La primera propuesta fue tener la Escuela en un bloque de dos semanas, pero debido a que la segunda semana se encontraba superpuesta con el *X Congreso de la Sociedad Mexicana de Cristalografía (SMCr)*, se decidió que la Escuela tomaría un receso en la semana que se celebraba el *X Congreso de la SMCr*.

Aproximadamente la mitad de los participantes inicialmente aceptados en la edición presencial de marzo de la escuela se preinscribieron para la edición virtual. Dentro de los tres días posteriores al anuncio de esta edición virtual de la Escuela se recibieron más de 120 solicitudes, muchas más de las que era posible aceptar. Después de una cuidadosa selección; fueron escogidos, 64 participantes y 11 instructores de 14 países de los cuales 11 eran de América Latina.

Cabe destacar que todos los instructores tienen una amplia experiencia en Cristalografía de Moléculas Pequeñas, frecuentemente actuando como revisores de la revista *Acta Crystallographica* y tres de ellos, la doctora María de Jesús Rosales Hoz y los doctores Javier Alcidez Ellena y Vojtech Jancik son coeditores de la revista *Acta Crystallographica Sec. C y E*, respectivamente.

Las conferencias se llevaron a cabo en la plataforma

Zoom y Google Classroom se utilizó para la distribución de materiales de la clase. Adicionalmente, se creó un grupo en la plataforma WhatsApp para el planteamiento de preguntas y respuestas relacionadas con la resolución de problemas fuera del horario escolar, así como anuncios de última hora.

El español y el inglés se utilizaron como idiomas principales, aunque las preguntas formuladas en portugués por estudiantes brasileños fueron también contestadas. Todas las conferencias fueron grabadas y puestas a disposición de los participantes el mismo día

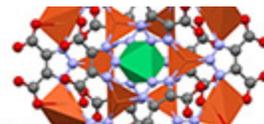
Luego de una breve inauguración, la escuela comenzó con una fascinante charla sobre la "Historia de la Difracción de Rayos X" presentada por la Dra. María de Jesús Rosales Hoz del Cinvestav, IPN, México y continuó con una charla sobre "Simetría" a cargo del Dr. Leopoldo Suescun de la FQ-UdelaR, Uruguay. Después, en los días consecutivos, las pláticas sobre la "Física de la Difracción" fueron impartidas por la Dra. Florencia Di Salvo del INQIMAE-UBA en Argentina, Dr. Javier Ellena (IFSC-USP, Brasil), y Dr. Leopoldo Suescun, mientras que Dr. Hamilton Napolitano (UEG, Brasil) dio una conferencia sobre "Métodos Directos y Métodos de Patterson". La primera semana terminó con una charla sobre "Colección de datos y procesando con APEX3" por el Dr. Bruce Noll (en representación de Bruker AXS) y Dr. Vojtech "Beto" Jancik (UNAM, México). Para la próxima semana se prepararon diversos ejercicios para los estudiantes y se les animó a participar en el *X Congreso de la SMCr*. La semana libre permitió una reunión del comité organizador para evaluar el progreso de la escuela y los métodos de enseñanza empleados. Como resultado, el programa de la segunda semana se modificó para operar de manera más eficiente en las conferencias.

La segunda semana comenzó con una introducción a SHELX y continuó con una conferencia sobre "Solución y refinamiento de estructuras básicas", seguida de "Validación" impartida por Javier Ellena y Vojtech Jancik. Luego de una sesión práctica, el Dr. Diego Martínez (UNAM, México) impartió conferencias sobre "el refinamiento del desorden". Los días miércoles y jueves por la mañana se dedicaron exclusivamente a la sesión práctica de solución, refinamiento, desorden y validación de estructuras, enseñando a los estudiantes cómo utilizar las restricciones y las limitaciones para refinar el desorden. Al finalizar, Bruce Noll dió una conferencia sobre el uso del programa DSR de Daniel Kratzer que integra instrucciones para el refinamiento de desorden de forma automatizada. El curso previo del examen final se centró sobre "Procesamiento y

## 11 Países de Latinoamérica participaron en este evento virtual

### 3rd LACA School

Small Molecule Crystallography - Virtual Edition



refinamiento de datos de diferentes tipos de gemelos”. La última conferencia de la Escuela se dedicó a la base de datos estructural de Cambridge y fue impartida por las Dras. Suzanna Ward e Ilaria Gimondi de la CCDC, quienes mostraron las características de la base de datos y enseñaron cómo hacer una postal navideña con una estructura de polioxometalato. Después del último descanso y una sesión práctica sobre la CSD realizada por la Dra. Natalia Alvarez Failache, de la UdelaR, Uruguay, se realizó la ceremonia de clausura de la Escuela en donde estuvieron presentes, además de los participantes y profesores de la Escuela, el Dr. Sven Lidin y la Dra. Hanna Drabowska, el presidente y vicepresidenta de la IUCr, respectivamente; la Dra. Graciela Díaz de Delgado, representante del Comité Ejecutivo de la IUCr para América Latina; y el Dr. José Reyes Gasga, presidente de la Asociación Cristalográfica. Tras las palabras de clausura, Javier Ellena rindió un homenaje a la Dra. Graciela Punte por su destacado trabajo en la enseñanza de la Cristalografía en América Latina. Finalmente, el Dr. Leopoldo Suescun organizó un brindis virtual y la Escuela terminó con un juego corto de Kahoot en un estado de ánimo relajado.

Los organizadores de la Escuela agradecen a la UNAM, IUCr, Asociación Latinoamericana de Cristalografía, Sociedad Mexicana de Cristalografía, Associação Brasileira de Cristalografía, Asociación Argentina de Cristalografía y la Red Uruguaya de Cristalografía por su invaluable apoyo para la organización durante el desarrollo de las actividades de la Escuela y a la UNAM, IUCr, Bruker, Molecular Dimensions/Anatrax, Mitegen, MBraun y el CCDC por su patrocinio que hizo posible la realización de la Escuela. Además, agradecen la paciencia, el interés y el buen humor de los alumnos quienes dedicaron tantas horas de su vida, en tiempos difíciles de confinamiento y la convivencia como “compañeros de zoom”, también a los profesores ya que juntos compartieron un aprendizaje lleno de esperanza para un mejor futuro.



Dra. Natalia Álvarez Failache, de la UdelaR, Uruguay.

<https://www.iquimica.unam.mx/LACA/>

# 2° Informe del Dr. Vojtech Jancik Coordinador del CCIQS UAEM-UNAM

Dr. Diego Martínez Otero

El Dr. Vojtech Jancik presentó el día 15 de enero de 2021, de forma virtual a través de la plataforma Zoom, su segundo informe como coordinador del Centro Conjunto de Investigación en Química Sustentable CCIQS UAEM-UNAM.

Al evento asistieron el Mtro. Marco Antonio Luna Pichardo, Secretario de Docencia de la UAEM, en representación del Dr. Alfredo Barrera Baca, Rector de la UAEM; el Dr. Víctor Varela Guerrero, Director de la Facultad de Química de la UAEM, el Dr. Julio Solano González, en representación del Dr. William Henry Lee Alardín, Coordinador de la Investigación Científica de la UNAM, el Dr. Jorge Peón Peralta, Director del Instituto de Química de la UNAM; así como académicos y alumnos de la UAEM, UNAM y del CCIQS UAEM-UNAM.

El Dr. Jancik comenzó su informe agradeciendo la presencia de los invitados e informó que debido a las recomendaciones de las autoridades a causa de la emergencia sanitaria ocasionada por COVID-19, las actividades de investigación y docencia dentro del CCIQS UAEM-UNAM se encuentran canceladas desde el 18 de marzo del 2020 y únicamente se permite el acceso a personal administrativo y académico con el objetivo de realizar actividades esenciales como mantenimiento de la infraestructura básica y científica del centro.

En su informe el Dr. Jancik dio a conocer la estructura organizacional del CCIQS mencionando que el centro cuenta con un coordinador que se alterna cada 2 años entre ambas universidades, así como el responsable administrativo y la comisión técnica, órgano máximo que regula los aspectos académicos y administrativos. El CCIQS está integrado por 26 académicos de investigación, de 8 técnicos académicos, resaltando la contratación del M. en C. Raúl Tafolla Rodríguez, contratado por el Instituto de Química de la UNAM para la oficina de Vinculación del CCIQS.

Actualmente el CCIQS cuenta con 247 alumnos registrados en los diferentes niveles de ambas universidades, así como prácticas profesionales, servicio social y estancias de investigación.

También, el Dr. Jancik informó los eventos académicos, que a causa de las restricciones de las autoridades, tuvieron que desarrollarse de forma virtual, para promover la colaboración académica, siendo estos el *XI Simposio Interno del CCIQS*, celebrado el 7 de diciembre del 2020,

la *3rd LACA School on Small Molecule Crystallography*, con 70 participantes e instructores de 14 países, del 23 de noviembre al 11 de diciembre y el *LatinXChem* que se llevó a cabo el 7 de septiembre del 2020 organizado por químicos de origen latino y en donde el Dr. Joaquín Barroso, académico del CCIQS, fue parte del comité organizador; además de un evento de presentación de carteles en la plataforma Twitter que contó con 1261 trabajos provenientes de 43 países.

El Dr. Jancik presentó la producción científica del CCIQS UAEM-UNAM, la cual consiste de 75 artículos con factor de impacto promedio de 3.72 y un promedio de 2.85 artículos por académico al año, entre ellos, artículos en *Chemical Reviews*, *Journal of Hazardous Material Letters*, *Journal of Materials Chemistry C*, *Catalysis*, *International Journal of Biological Macromolecules*. Adicionalmente hizo un reconocimiento a los académicos del CCIQS cuyo trabajo fue reconocido por las colecciones especiales de *RSC: Collections Celebrating Recent Chemical Science in Mexico (2018-2020)*.

El coordinador del CCIQS mencionó algunos indicadores de la calidad de investigación del centro, como la capacidad de captar recursos financieros, tales como los 20 proyectos vigentes con financiamiento de instituciones como CONACyT, SlyEA-UAEM y DGAPA-UNAM y 4 proyectos de supercómputo; así como la formación de recursos humanos en los cuales se han podido graduar 13 alumnos de licenciatura, 12 de maestría y 8 de doctorado de los diferentes programas de UAEM y UNAM.

El Dr. Jancik felicitó al Dr. Fernando Cortés y al Dr. Joaquín Barroso por su ascenso al nivel SNI III y SNI II respectivamente, así como también al Dr. Barroso por ganar el concurso #RealTimeChem en Twitter en la categoría #BackyardChem.

Asimismo, reconoció a los alumnos y a sus tutores que han obtenido reconocimientos en los diferentes eventos realizados.

En cuanto a las acciones organizacionales, legislativas y administrativas, el Dr. Jancik hizo mención que la Comisión Técnica del CCIQS pudo sesionar de forma presencial durante los primeros meses del año 2020 y posteriormente de forma virtual para atender los asuntos necesarios como revisión de lineamientos y reglamentos, para que puedan reflejar la situación actual del Centro.



# Centro Conjunto de Investigación en Química Sustentable UAEM-UNAM



## Informe de Actividades 2020

El coordinador apuntó que en agosto del 2020, la UAEM realizó la apertura parcial de sus instalaciones, incluyendo el CCIQS para atender los asuntos administrativos urgentes, así como preparar las instalaciones para una apertura escalonada. También mencionó que se han creado los protocolos y lineamientos para la reapertura eventual del CCIQS UAEM-UNAM cuando la situación sanitaria lo permita y que se han creado formatos electrónicos para el informe trimestral del programa operativo anual y para el informe anual de los académicos, así como formatos electrónicos para el registro de muestras en los servicios analíticos del CCIQS que facilitan el envío de la información vía remota.

El coordinador del CCIQS hizo énfasis en el mejoramiento de las condiciones de seguridad del Centro, así como la organización de las áreas comunes que presentaban un riesgo a la seguridad desechando de forma segura residuos y material peligroso almacenado. Mencionó que debido las modificaciones en las políticas de la UAEM, se cambió el personal de la empresa privada contratada para el CCIQS por personal de la UAEM y se dotó de equipos y mobiliarios para habilitar el área de enfermería, sin que antes se llevarán a cabo obras de mantenimiento correctivo y obras de adecuación, y que está a la espera de la asignación de personal médico por parte de la UAEM, para que se brinde atención a todos los centros del campus una vez que se reanuden las labores presenciales. Además, se inició con la adecuación del nuevo laboratorio de Química Supramolecular.

Asímismo, se realizaron mantenimientos preventivos y correctivos de los equipos de servicios analíticos del CCIQS, como Difracción de Rayos X de Monocrystal, Difracción de Rayos X de Polvos y el Espectrómetro de Masas micROTOF II, así como la reparación del probe

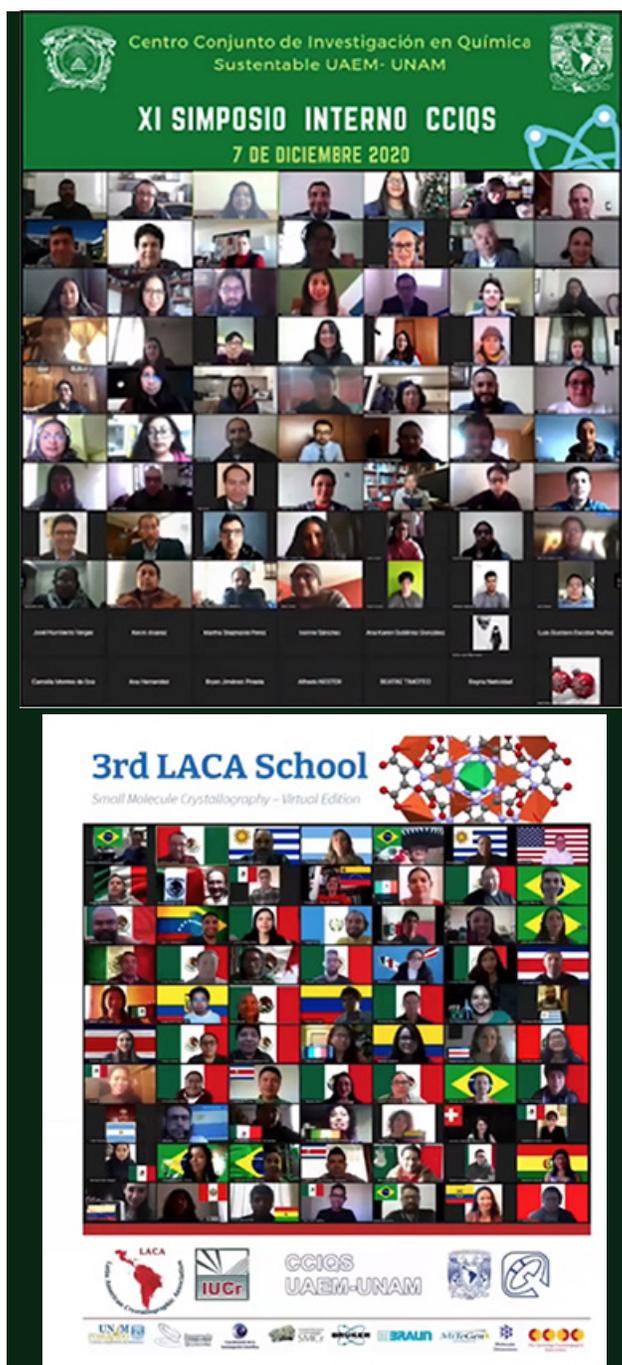
BBF del equipo de RMN de 300 MHz y el mantenimiento preventivo del sistema de generación de nitrógeno líquido del Centro.

El Dr. Jancik concluyó con una reflexión y un mensaje para toda la comunidad "Es indudable que nadie se imaginaba que el centro estaría cerrado por más de 10 meses, sin embargo, es nuestra realidad que al parecer no va a cambiar pronto, quisiera felicitar a mis compañeros del CCIQS que aún en estas condiciones y sin la posibilidad de continuar con su trabajo experimental han publicado artículos, titulado y graduado alumnos, impartieron clases y han organizado eventos. Sin embargo, creo que esta situación también nos ha ayudado a aprender cosas nuevas, implementar en el trabajo cotidiano plataformas electrónicas para la enseñanza y organización del trabajo, aunque la organización de congresos, escuelas y concursos virtuales carecen del contacto humano y de la posibilidad de interacción en persona, nos permiten asistir a eventos que estaban anteriormente restringidos por la distancia, costos, fechas o tiempo. Esto es seguramente una ganancia que permite también ampliar nuestras posibilidades en docencia y a nuestros alumnos en el caso que necesiten tomar una clase que se imparte en otra ciudad: "creo que cuando se termine esta etapa de la pandemia y podamos regresar a los laboratorios con nuestros alumnos, vamos a estar todos altamente motivados para continuar con más esfuerzo y dedicación en el trabajo para el beneficio de nuestras instituciones y del país".

Después de presentar a la Dra. Dora Alicia Solís Casados como la nueva Coordinadora del CCIQS, el Dr. Víctor Varela Guerrero, felicitó al Dr. Jancik y resaltó los resultados mostrados en el informe donde se demuestra que a pesar de las circunstancias por las que estamos pasando, es posible continuar con la investigación.



Imagen: XI Simposio Interno del CCIQS vía Zoom llevado a cabo el 7 de diciembre de 2020.



El Dr. Jorge Peón Peralta felicitó al Dr. Jancik, al igual que a todo el CCIQS por la productividad científica obtenida: artículos, alumnos titulados, clases y eventos organizados, a pesar de los inconvenientes de la pandemia.

Por su parte, el Dr. Julio Solano González señala al CCIQS como un modelo a seguir por ser ejemplo de un gran esfuerzo entre las 2 universidades. Señaló la producción científica y de formación de recursos humanos como uno de los pilares del CCIQS e hizo énfasis en la continuidad de los servicios analíticos externos de forma restringida, así como la organización de eventos nacionales e internacionales manteniendo la dinámica del CCIQS. Felicitó a nombre del Dr. William Lee Alardín y del suyo, a todos los integrantes del CCIQS, académicos, administrativos, estudiantes y personal de apoyo por el trabajo y esfuerzo realizado.

El programa terminó con las palabras del Mtro. Marco Antonio Luna Pichardo quien señaló que el Dr. Jancik brindó un amplio y conciso panorama de su segundo año de gestión, resultado de la colaboración de la UAEM y de la UNAM. Apuntó que la convergencia de los propósitos de los espacios universitarios permite alinear todos los esfuerzos para educar a más personas con mayor calidad y en el caso particular del CCIQS con la ciencia para la dignidad humana y la productividad. Resaltó que en los 12 años de historia del CCIQS el Centro ha promovido la cooperación académica y científica entre ambas universidades, contribuyendo al desarrollo de importantes investigaciones cuyos resultados se han materializado a través de revistas de alto prestigio a nivel mundial.

Agradeció el elevado compromiso demostrado, así como el sentido de responsabilidad y al mismo tiempo reiteró el respaldo de la rectoría de la UAEM para dar continuidad a los proyectos, dando fin a este evento.

# Los derechos de autor

## ¿Qué son y en qué consisten?

M. en C. Guillermo Roura Pérez  
Secretaría de Vinculación, Instituto de Química, UNAM

En intervenciones pasadas hemos platicado mucho acerca de la propiedad industrial, es decir, todos los aprovechamientos industriales y comerciales que podemos hacer de nuestros productos y resultados de investigación a través de una patente, un diseño industrial o incluso una marca.

En esta ocasión trataremos el tema de los derechos de autor. Para hablar de derechos de autor podemos irnos tan lejos como el Convenio de Berna de 1886, el cual trata sobre la protección de las obras y los derechos de sus autores (músicos, poetas, pintores, etc.); este convenio permitía que dichos autores controlaran quién utilizaba sus obras y bajo qué condiciones y circunstancias. Pero, vamos por partes.

### ¿Qué es el derecho de autor?

El derecho de autor es el reconocimiento que hace el Estado, por ejemplo el Estado mexicano, a un creador de obras literarias y artísticas. Permite su protección para que su autor goce de privilegios exclusivos que se conocen como el derecho moral y patrimonial.<sup>1</sup> El derecho moral en pocas palabras es el derecho que reconoce al autor como único y perpetuo titular de los derechos sobre las obras de su creación, por ejemplo un derecho de paternidad. Entre sus características principales podemos mencionar que es inalienable (que no se puede enajenar, vender o ceder a nadie más); es imprescriptible (que nunca caducará); es irrenunciable (que el autor no puede renunciar a él) y es inembargable (que no se le puede embargar al autor). En lo que respecta al derecho patrimonial, se refiere al derecho que tiene el autor de explotar de manera exclusiva sus obras o de autorizar a otros su posible explotación. Derivado de los conceptos anteriores, debemos reconocer que un autor es aquella persona física que ha creado una obra literaria o artística. La Ley busca brindar protección a sus obras y conferir derechos en pro de estimular su creatividad.

### En contraste, ¿Qué debemos entender por una obra?

De acuerdo con los artículos 3° y 13° de la Ley Federal del Derecho de Autor, las obras son aquellas creaciones originales susceptibles de ser divulgadas o reproducidas

en cualquier formato o medio pudiendo ser estas obras: literarias, musicales, teatrales, danza, pictórica o dibujo, escultóricas o de carácter plástico, caricatura, arquitectónica, cinematográfica, audiovisuales, programas de radio y televisión, software, fotográficas, obras de arte aplicado como diseño gráfico o textil, obras de compilación e incluso derivadas como las traducciones, adaptaciones y arreglos.

En este punto, es importante detallar que de manera análoga a la propiedad industrial, donde hay materia que no se puede proteger por patente, en el derecho de autor también hay materia que no es susceptible de protección, por ejemplo: las ideas, las fórmulas y los conceptos; los actos mentales, juegos o negocios; los textos legislativos; y los refranes, leyendas y escalas métricas. Por lo tanto, incurre en ignorancia o falsedad aquél que afirma que su idea goza de derecho de autor, salvo que dicha idea haya sido manifestada en una obra fijada, expresada o representada en un soporte material.

A continuación vamos a explicar por qué esto es así: la protección de las obras existe desde el momento en que se fijan en un soporte material, sin importar cuál sea el mérito o expresión de la obra, así como su destino. Por fijación debemos entender el modo en que se expresa la obra a través de imágenes, sonidos, elementos, figuras o cualquiera que nos ayude a representar nuestra obra, incluso digital. Y por soporte material, debemos entender todo aquello que brinda un sustento físico a la obra y que permite su percepción a través de los sentidos, así como la posibilidad de reproducirse o comunicarse, incluyendo evidentemente los soportes electrónicos, una escultura, una fotografía, un documento electrónico de texto, por citar algunos ejemplos. Por lo tanto, en principio, no es necesario realizar ninguna clase de registro ni cumplir con formalidad alguna para que las obras y sus creadores gocen de la protección por derechos de autor; insisto, siempre y cuando la obra se encuentre desde su creación fijada en un soporte material.

Es importante destacar que sí hay beneficios para registrar la obra ante las autoridades competentes. En primer lugar, te permite obtener una prueba de que eres el autor primigenio de la obra registrada. En segundo lugar, te permite resguardar tu obra de manera permanente en el registro público del derecho de autor. En tercer lugar,

<sup>1</sup>Ley Federal del Derecho de Autor, Artículo 11°. [En línea]. Diario Oficial de la Federación. México, 01 julio de 2020. Disponible en: <http://www.diputados.gob.mx/LeyesBiblio/index.htm>

**"Una vez que se haga el registro de la obra, ésta deberá ostentar la leyenda “Derechos Reservados” o “D.R.” junto con el símbolo de copyright ©"**

dar publicidad a la obra derivado de la existencia de su inscripción en dicho registro, lo que eventualmente también permitiría – incluso – obtener ingresos o las famosas regalías por el uso y comunicación, o cualquier otro tipo de explotación bien definida de la obra creada bajo condiciones y tiempo claramente expresados a través de un contrato. Por ejemplo, entre las obras que pueden generar regalías están las aplicaciones informáticas o software, los registros audiovisuales como la fotografía y el cine, las obras literarias, entre muchas otras. Una vez que se haga el registro de la obra, ésta deberá ostentar la leyenda “Derechos Reservados” o “D.R.” junto con el símbolo de copyright ©.

Finalmente, un tema que es importante destacar es que derivado de la entrada en vigor del nuevo tratado de libre comercio con Estados Unidos y Canadá (TMEC), hubo diversas reformas a la Ley Federal del Derecho de Autor. Entre ellas, una de las más importantes tiene que ver con las medidas tecnológicas de protección y la información sobre la gestión de derecho. Por medidas tecnológicas de protección debemos entender la protección de las obras y/o creaciones, así como los derechos de los autores, para controlar el acceso a dicha obra a través del uso de alguna tecnología, dispositivo o componente. Lo anterior no aplica para aquellos que se dedican a la fabricación de dispositivos o componentes y sus partes para productos electrónicos y de computación, siempre y cuando dichos productos no se encuentren destinados a quebrantar las medidas tecnológicas de protección. Para el caso de información sobre la gestión de derechos, debemos entenderlo como los datos, avisos o códigos que permiten identificar una obra y a su autor, como por ejemplo, los metadatos asociados a un archivo electrónico. Así, esta información permite establecer términos y condiciones para el uso de la obra.

Algunas excepciones interesantes a las medidas tecnológicas de protección son: el acceso por parte del personal de una biblioteca – sin fines de lucro – a una obra a la cual no tendrían acceso de otro modo con el único propósito

de decidir si se adquiere algún ejemplar de la misma y tampoco se considera que se transgrede o elude las medidas tecnológicas de protección a las actividades realizadas – igualmente sin fines de lucro – por una persona con el objeto de hacer accesible una obra para personas con capacidades diferentes.



El símbolo del copyright, “©”, se usa para indicar que una obra está sujeta al derecho de autor.

En conclusión, registrar una obra es tan fácil como llenar una solicitud de registro, pagar 280 pesos por concepto de registro para obras artísticas y literarias, y adjuntar dos ejemplares de la obra. Si con motivo de actividades profesionales, laborales o académicas en una institución como la UNAM, te encuentras en la necesidad o tienes la intención de poder registrar tu(s) obra(s), es la Dirección General de Asuntos Jurídicos a través o con el apoyo de las unidades y secretarías de vinculación la que realizan este trámite, ya que es dicha dirección la representante formal y legal de la institución.

# Curso de Estructura de Biomacromoléculas en Solución (SAXS)

Dra. Annia Rodríguez Hernández

La estructura de las moléculas puede determinarse a partir de la interacción que tengan con los rayos X.

Desde su descubrimiento por el Profesor Wilhelm Roentgen, estos rayos “desconocidos” o rayos X han tenido innumerables aplicaciones. De hecho, estamos familiarizados con su uso en la determinación de estructuras óseas en radiografías, en la visualización de objetos en escáneres o incluso en el tratamiento de algunos tipos de cáncer. Sin embargo, debido al rango de longitudes de onda que los caracterizan, los rayos X además son usados para determinar la estructura de las moléculas. En biología estructural, los rayos X son empleados en varias técnicas como la cristalografía, la crio-microscopía electrónica, así como en técnicas de dispersión. Entre este último tipo de técnicas, la dispersión de rayos X de ángulo pequeño (Small Angle X-Ray Scattering o SAXS, por sus siglas en inglés) se caracteriza por visualizar moléculas en solución en resoluciones en un rango de 10-20 Å. En un estudio de SAXS, un haz de rayos X se hace pasar a través de una solución de la macromolécula de interés y como resultado, el haz es dispersado en diferentes ángulos e intensidades, los cuales son captados en un detector. A través de un análisis de gráficos de los datos colectados se puede determinar el tamaño, radio y forma de las macromoléculas que componen la solución.

Con el fin de difundir el potencial uso de SAXS, el Laboratorio Nacional de Estructura de Macromoléculas (LANEM-IQ) organizó un curso de esta técnica enfocada a la determinación estructural de macromoléculas en solución. Este curso fue impartido de manera virtual del 12 de marzo al 19 de mayo del 2021, por los doctores Melissa Gräwert y Stefano Da Vela del European Molecular Biology Laboratory (EMBL) de Hamburgo, Alemania. Los instructores de este curso son expertos en la técnica SAXS y laboran en la línea P12 del Deutsches Elektronen-Synchrotron (DESY), línea especializada para el estudio de macromoléculas utilizando la dispersión en ángulo pequeño. El curso se llevó a cabo en 7 sesiones, los días miércoles de 10:00-11:30 am (horario de la CDMX) y contó con la participación de alumnos e investigadores de diferentes partes de México y el mundo, quienes desarrollan proyectos relacionados con la biología estructural y están interesados en la técnica SAXS. El enfoque del curso fue introductorio y se centró en la determinación



Ponentes: Dra. Melissa Gräwert y el Dr. Stefano Da Vela.

de estructuras de biomacromoléculas, incluyendo proteínas, ácidos nucleicos y complejos diversos.

A lo largo de las sesiones se abordó la correcta preparación de muestras, la determinación y sustracción del blanco, la recolección y análisis de datos, así como la determinación de modelos estructurales y el depósito de estructuras/modelos en la base de datos de SAXS ([www.SAXBDB.org](http://www.SAXBDB.org)). Entre los temas que destacaron estuvo la diversidad de aplicaciones que puede tener la técnica SAXS, pues es posible usarla en sistemas flexibles en los que otras técnicas no consiguen obtener datos estructurales. SAXS es también una técnica adecuada para determinar la dinámica de moléculas con respecto a su estado oligomérico, debido a que los cambios de tamaño y conformación tridimensional son fácilmente detectados y se puede obtener además un modelo tridimensional. Este curso de SAXS ilustró sobre cómo evaluar los cambios conformacionales que una biomacromolécula puede tener al interactuar con ligandos u otras macromoléculas.

Finalmente, se abordaron casos particulares en los cuales se planteó la utilidad de SAXS con otras técnicas acopladas, como el SEC-MALS, con el cual se logra separar componentes en muestras de complejos estables y determinar con exactitud los pesos moleculares de dichos componentes.

En este curso, los alumnos inscritos tuvieron la oportunidad de participar continuamente durante las sesiones, también contaron con una plataforma de PADLET que les permitió tener disponibilidad de los temas que se verían en cada clase y otros recursos académicos como videos, artículos relacionados, un chat de preguntas y respuestas y el link directo para descargar el programa ATSAS, el cual permite el análisis completo de datos de SAXS. Esta plataforma quedará disponible para todos los participantes por seis meses.

# Small Angle X-ray Scattering data for Biomolecules.



Sesión de curso SAXS en línea.

Durante una de las sesiones, los alumnos discutieron sobre varios artículos en los que se demuestra el uso de SAXS en complementación con otras técnicas estructurales y biofísicas para resolver problemas científicos de alto impacto. Tal fue el caso de su uso en la determinación de varias estructuras de ADN G-cuádruple de telómeros humanos (Robert C. Monsen *et. al.*, 2021). En una de sesiones se contó con la participación de la doctora Elisabeth Zielonka, quien es encargada de administrar los cursos científicos que se llevan a cabo a través de personal del EMBL. La Dra. Zielonka invitó a todos los participantes a realizar estancias de investigación y a tomar cursos en las diferentes sedes del EMBL en Europa, incluyendo cursos más avanzados de SAXS.

Cabe hacer notar que además de aprender sobre la técnica de SAXS, todos las participantes tuvieron la oportunidad de aprovechar este medio para establecer colaboraciones entre grupos de investigación. Este fue el caso de varios investigadores del Instituto de Química, quienes pudieron establecer líneas de colaboración para sus estudios estructurales con investigadores de la línea P12 de Hamburgo. De esta manera estarán enviando

muestras durante el otoño e invierno del presente año al DESY, sincrotrón Alemán, para colecta de datos.

Este curso tuvo una gran aceptación y benefició a un total de 29 personas, entre 25 alumnos, 2 organizadores y 2 profesores quienes tuvimos la fortuna de participar y reunirnos durante estas semanas para compartir nuestros intereses en biología estructural y expandir nuestros conocimientos y contactos científicos. Agradecemos la colaboración de los involucrados en difundir información sobre el curso en las diferentes redes del Instituto de Química y del EMBL, en particular a la M. en C. Ed. Hortensia Segura Silva.

# Ciclo de conferencias: Instituto de Química de la UNAM & Sorbonne Université

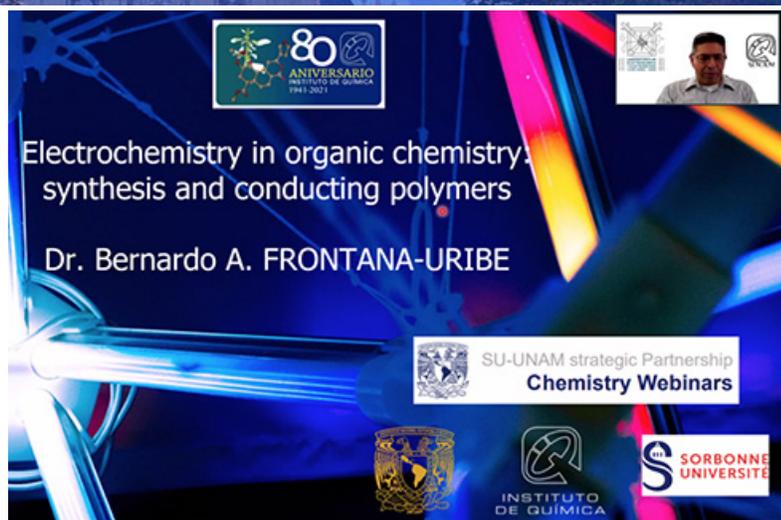
Dr. Rubén Omar Torres Ochoa

Con el objetivo de estrechar los lazos entre la Universidad Nacional Autónoma de México y la Sorbonne Université, y teniendo de fondo el 80 Aniversario del IQ, se llevó a cabo un ciclo de conferencias de investigación impartidas por investigadores de ambas instituciones.

La semilla de estas reuniones científicas quedó sembrada en febrero de 2020 a través de la visita de un grupo de investigadores de la Sorbonne a los Institutos de Química, Materiales y Física. Los seminarios tienen como objetivo difundir las distintas líneas de investigación que se abordan en ambas universidades, buscando coincidencias o puntos de posible enlace, para llegar a establecer colaboraciones que faciliten el intercambio académico y estudiantil en ambas direcciones en un futuro cercano.

Por parte del Instituto de Química, investigadores de todos los departamentos han presentado sus líneas de trabajo, así como los resultados más destacados que han obtenido. Uno de los participantes por parte del Instituto de Química fue el Dr. Ronan Le Lagadec, integrante del Departamento de Química Inorgánica, quien impartió el seminario titulado *Exploring the anticancer activity of cyclometalated complexes*, en el cual expuso avances importantes en el desarrollo de nuevos complejos organometálicos de rutenio e iridio, y su posible utilización como agentes anticancerosos. Otro de los participantes fue el Dr. Marcos Hernández, del Departamento de Química Orgánica, quien impartió la plática *"Effect of acidity in hydrogen bond donors applied in molecular recognition and organocatalysis"*, donde exhibió los estudios que ha llevado a cabo su grupo, referentes al campo de interacciones débiles entre diferentes sustratos y organocatalizadores de diversos tipos, y cómo estas pueden llegar a alterar el resultado de una reacción desde el punto de vista estereoquímico.

Por parte de la Sorbonne, uno de los expositores fue el Dr. Louis Fensterbank, adscrito al Institut Parisien de Chimie Moléculaire, en cuya plática, titulada *Light for radical chemistry and organometallic catalysis*, describió brevemente sus líneas de



Electrochemistry in organic chemistry: synthesis and conducting polymers

Dr. Bernardo A. FRONTANA-URIBE

SU-UNAM strategic Partnership  
Chemistry Webinars

INSTITUTO DE QUÍMICA

SORBONNE UNIVERSITÉ

Sesión de Zoom del Dr. Bernardo Antonio Frontana Uribe del Departamento de Química Orgánica del IQ-UNAM.

trabajo, haciendo énfasis a la parte de catálisis dual que promueve la ciclización alquilativa de *o*-alquilfenoles con yoduros de alquilo, la cual ocurre a través de la adición oxidativa de los haloalquinos a especies de oro(I) fotoexcitadas. Otro de los presentadores de la universidad francesa fue el Dr. Alejandro Pérez Luna, quien brevemente destacó su trabajo con la plática *"Tandem radical-polar reactions involving dialkyl zinc reagents"*, con la cual demostró la utilidad en síntesis que pueden tener compuestos organometálicos de zinc en procesos tándem de adición 1,4 y su facilidad para sincronizarse con otras transformaciones como la condensación aldólica, en lo referente a la preparación de productos orgánicos estructuralmente diversos.

Se tienen grandes esperanzas de que a corto plazo y una vez que la pandemia así lo permita, tomen lugar los primeros intercambios entre las comunidades académicas de ambas instituciones educativas.

Finalmente, estos seminarios dieron paso a un par de conferencias públicas impartidas por los profesores Ludovic Bellot-Gurlet y Philippe Karoyan. Este evento fue organizado en el marco de la celebración que la Sorbonne Université le dedicó a México con motivo de los diversos acontecimientos históricos que se celebran este año 2021 en nuestro país.

# El Centro GLACIER

Dra. Corina Diana-Ceapă, Dr. José Rivera Chávez, Dr. Eduardo Hernández Vázquez y Dra. Carol Siseth Martínez Caballero.

La actual pandemia provocada por el virus SARS-CoV-2 ha demostrado que la lucha contra las enfermedades infecciosas es un desafío global que requiere la cooperación y esfuerzo de diferentes sectores (academia, sector privado, instituciones de salud y responsables políticos) de todas las regiones del globo terráqueo. En atención a la formación de grupos multilaterales que permitan fortalecer la vigilancia de enfermedades infecciosas emergentes, la resistencia a los antimicrobianos y el cambio climático, el Servicio Alemán de Intercambio Académico (DAAD) financió la creación de ocho “Centros Globales” interdisciplinarios para abordar estos retos de la humanidad, a través del intercambio académico internacional, mencionó el profesor Joybrato Mukherjee, presidente del DAAD Alemania.

Entre ellos, el nuevo “Centro Latinoamericano-Alemán para la Investigación y Formación en Infecciones y Epidemiología” denominado “GLACIER” recibirá 2,8 millones de euros en un periodo de cinco años (2021-2025) con una posible extensión hasta 2030. [Global Center] El Centro es administrado conjuntamente por la UNAM, el Instituto de Inmunología Médica de la Universidad Martin-Luther de Halle-Wittenberg, el Instituto Leibniz de Bioquímica Vegetal, el Instituto de Virología del Hospital Universitario Charité de Berlín y la Universidad de La Habana.

El objetivo del consorcio GLACIER es desarrollar un programa centrado en la investigación y el aprendizaje basado en la resolución de problemas de manera multidisciplinaria, que permita fortalecer la vigilancia de enfermedades infecciosas emergentes, el diagnóstico y prevención de la resistencia a los antimicrobianos, así como el desarrollo de nuevas vacunas y tratamientos farmacológicos –principalmente en el contexto de las necesidades de Latinoamérica–. Para ello, el equipo de trabajo se conformó sumando las capacidades de expertos regionales y alemanes en temas de epidemiología, virología y descubrimiento de moléculas bioactivas.

El centro está comprometido con el enfoque integral “una sola salud” (“one health”).

El logotipo de GLACIER fue diseñado por la Técnica Académica Hortensia Segura Silva del IQ-UNAM, en éste se ve reflejada la colaboración entre Latinoamérica y Alemania para desarrollar redes científicas para la investigación de enfermedades infecciosas.



## Contribución del IQ y de la UNAM a GLACIER

Entre los principales socios locales de GLACIER se encuentra la Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM) con sede en la Ciudad de México. La UNAM es una institución internacional catalogada de excelencia y considerada como una de las mejores universidades de América Latina y con gran visibilidad en otras partes del mundo, gracias a su alta actividad en materia artística, tecnológica y de investigación. Esta última área destaca por su excelente formación de estudiantes, numerosos cursos a nivel de posgrado, publicaciones en revistas internacionales y su personal académico con alta formación.

El equipo mexicano es liderado por la Dra. Ana Elena Escalante Hernández, Directora del Instituto de Ecología e incluye además al Instituto de Química, la Facultad de Medicina, el PUIS (Programa Universitario de Investigación en Salud), la Facultad de Medicina Veterinaria y Zootecnia, el Instituto de Investigaciones en Matemáticas Aplicadas y en Sistemas, el Instituto de Ingeniería y la Escuela de Estudios Superiores campus Mérida. El enfoque consiste en el desarrollo de nuevas estrategias y herramientas de investigación para el diagnóstico, prevención y tratamiento de enfermedades infecciosas bacterianas, virales y parasitarias.

El Instituto de Química (IQ) cuenta con instalaciones de vanguardia para hacer investigación en los campos de síntesis y caracterización de nuevas moléculas, genómica y biología celular y molecular. La infraestructura permite



Integrantes del Centro GLACIER por parte del Instituto de Química.

manipular de forma segura agentes biológicos de amplio espectro y moderado riesgo e incluye una colección de cepas patógenas resistentes aisladas en México.

Las líneas de investigación principales del grupo de investigadores son:

- ➔ Desarrollar métodos *in vitro* para la búsqueda de moléculas con potencial antimicrobiano.
- ➔ Obtener moléculas (por síntesis de compuestos diseñados por métodos computacionales o productos naturales) para el desarrollo antimicrobianos.
- ➔ Establecer la ventana terapéutica de moléculas con potencial antimicrobiano mediante estudios de citotoxicidad *in vitro*.
- ➔ Determinar los mecanismos de acción de moléculas con potencial anti-microbiano, particularmente antibacterianos (ciencias ómicas) y ensayos espectrofotométricos (inhibición enzimática).
- ➔ Optimizar moléculas líderes mediante métodos *in silico* y síntesis orgánica.
- ➔ Identificación de nuevos blancos y el diseño y uso combinado de antibióticos mediante estudios de biología estructural.

Uno de los objetivos a futuro del grupo de trabajo del consorcio GLACIER, con sede en la UNAM, es el monitoreo de genes de resistencia a los antimicrobianos encontrados principalmente en México y países latinoamericanos; los cuales en colaboración con las autoridades de salud, permitirán generar nuevas alternativas para el cuidado de la salud en la población.

Esta parte del proyecto es liderada por el Dr. Jorge Peón Peralta, Director del Instituto de Química de la UNAM, el Laboratorio de Microbiología (Dra. Corina-Diana Ceapă) y el Laboratorio de Micología (Dr. José Rivera-Chávez) de la UNAM, quienes contribuirán con la exploración de genomas y metagenomas utilizando herramientas bioinformáticas y pruebas de alto rendimiento para la búsqueda de antibacterianos frente a patógenos clínicos del grupo ESKAPE (*Enterococcus faecium*, *Staphylococcus aureus*, *Klebsiella pneumoniae*, *Acinetobacter baumannii*, *Pseudomonas aeruginosa*, spp.). Por su parte, el Dr.

Eduardo Hernández, encargado del grupo de Química Farmacéutica, dirigirá el diseño y síntesis química de nuevas moléculas orgánicas con potencial actividad antimicrobiana, enfocándose en blancos terapéuticos nuevos, así como el control de factores de virulencia asociados a patógenos como las biopelículas. Finalmente el grupo de biología estructural liderado por la Dra. Carol Siseth Martínez participará en la identificación de nuevos blancos y en el diseño y uso combinado de antibióticos mediante el estudio estructural, biofísico y bioquímico de proteínas participantes en procesos bacterianos clave, enfocándose en la lista de bacterias prioritarias publicada por la Organización Mundial de la Salud (OMS) incluyendo al patógeno *Mycobacterium tuberculosis*.

Finalmente, el equipo de trabajo de la UNAM, además de aportes referentes a la investigación (para los que el DAAD no ofrece fondos directamente), contribuirá con actividades docentes a nivel de posgrado, intercambio de estudiantes, colaboraciones multinacionales, organización de eventos y comunicaciones para público en general y especialistas, algunos de los cuales ya han comenzado. Damos la bienvenida a cualquier apoyo y alentamos el contacto de quienes puedan contribuir de alguna manera a esta desafiante iniciativa a largo plazo la cual indudablemente es necesaria para los retos en salud que se aproximan.

## Colaboradores latinoamericanos

La contraparte centroamericana pertenece a las principales instituciones nacionales de Costa Rica, Guatemala, Honduras, Nicaragua, El Salvador y Panamá. El principal objetivo de este grupo de instituciones es establecer las bases para el desarrollo e implementación de un programa de posgrado en sus países, enfocado en el estudio integral de las enfermedades infecciosas con el fin de brindar mejores recursos humanos para enfrentar los desafíos relacionados con la prevención y control de pandemias.

En conclusión, la contraparte centroamericana de GLACIER servirá tanto como una instalación de capacitación, como un centro y nodo clave para apoyar el desarrollo de capacidades para el diagnóstico, la vigilancia de enfermedades infecciosas emergentes y el desarrollo de terapias y vacunas en América Latina.

# La crisis de los semiconductores, los contenedores y la pandemia de Covid-19

M. A. José David Vázquez Cuevas/ Unidad de Cómputo y Tecnologías de la Información y Comunicación

Los semiconductores, también llamados microprocesadores o chips, se encuentran en todos los dispositivos que se utilizan actualmente en la vida cotidiana, desde los teléfonos móviles y las computadoras personales, hasta los dispositivos del Internet de las cosas (IoT), como los que se encuentran en pantallas de T.V. y refrigeradores de última generación.

Con el inicio de la pandemia de Covid-19 en los primeros meses de 2020, algunas industrias previeron una caída en la demanda de sus productos y redujeron su producción; tal fue el caso de la industria automotriz. Los automóviles nuevos, contienen alrededor de 100 microprocesadores en su estructura. Algunas empresas consultoras predijeron que se producirían menos vehículos durante el año (DW, 2021). Como consecuencia, los fabricantes de microprocesadores cambiaron sus líneas de producción (Kelion, 2021).

Debido al aislamiento provocado por la pandemia, muchos usuarios decidieron adquirir nuevas computadoras personales, tabletas y teléfonos móviles, para poder seguir desarrollando sus actividades de manera remota desde sus casas. Esto ocurrió principalmente en los ámbitos escolares y profesionales, y al mismo tiempo, muchas personas más, adquirieron nuevos dispositivos para ocupar su tiempo libre.

El primer indicio de esta crisis fue en julio de 2020, cuando la escasez de chips no permitió la creación de suficientes tarjetas gráficas (GPUs), situación que impactó en el ambiente de los usuarios de juegos de video (Gamers), quienes no pudieron adquirir los modelos más recientes de GPUs (Staff e-Vector, 2021). Los principales fabricantes de consolas de videojuegos también se vieron afectados por la escasez de semiconductores, al no poder satisfacer la demanda de sus productos más recientes (Miranda, 2020).

En el tercer trimestre de 2020, la demanda de automóviles nuevos, se recuperó más rápido de lo previsto y la demanda de productos electrónicos de consumo continuó aumentando (Kelion, 2021). La migración tecnológica de la red de telefonía 4G a la red 5G, igualmente ha contribuido de manera significativa.

La situación de la escasez afectó seriamente a la industria automotriz, a tal grado que las empresas automotrices japonesas Honda y Toyota suspendieron de manera temporal su producción en algunos países, incluido México (Staff e-Vector, 2021).

El gobierno alemán tuvo que intervenir en la parte del abastecimiento, al solicitar a las principales empresas fabricantes de microprocesadores (localizadas en Asia), un trato preferencial para poder cumplir con la producción de automóviles realizada por las empresas automotrices alemanas (DW, 2021).

Las principales empresas fabricantes de microprocesadores son TSMC y Samsung, se localizan en Taiwán y Corea del Sur, respectivamente. Analistas económicos estiman que las dos naciones asiáticas representan el 83% de la producción mundial de procesadores y el 70% de los chips de memoria (Kelion, 2021). China ha sido uno de los países más afectados con esta crisis, pues no solo fabrica dispositivos electrónicos, sino que también fabrica más automóviles que cualquier otra nación. Una de sus principales empresas, Huawei, realizó un enorme pedido para acumular una gran reserva de microprocesadores previo a la escasez de éstos.

Posteriormente, Estados Unidos le impuso una restricción comercial para impedir que solicitara más unidades. La situación es tan preocupante en Estados Unidos, que un grupo de senadores pidió al Presidente Biden tomar medidas para incentivar la producción de semiconductores en el futuro (Kelion, 2021), ya que algunas empresas estadounidenses han empezado a tener problemas para cumplir con el abastecimiento. Tal es el caso de Qualcomm, que fabrica los procesadores para las principales marcas de teléfonos inteligentes.

# CRISIS EN MEDIO DE LA PANDEMIA POR COVID-19

Aunado a lo anterior, la demanda masiva de dispositivos electrónicos ha incrementado el uso del transporte marino para distribuirlos entre los continentes. Estos buques mercantiles tienen una enorme carga de trabajo y cada día tienen que transportar más productos, provocando que los accidentes se presenten con frecuencia y como consecuencia, varios contenedores se caen por la borda y terminan en el fondo del mar (Zurita, 2021).

Se estima que en 2020 cayeron al mar un número superior a los 3000 contenedores y en el primer trimestre de 2021 ya son más de 1000 (Ashworth, 2021). Los accidentes se han producido en el Océano Pacífico, en una ruta marítima muy transitada, que conecta Asia con Norteamérica y que se caracteriza por no tener un buen clima. Aumentar el volumen de carga, acelerar las entregas y gastar el menor combustible, son argumentos que se han colocado por encima de invertir tiempo en revisar todos los protocolos de seguridad y garantizar un transporte seguro. Los buques tienen la orden de seguir navegando en la ruta establecida, a pesar de haber riesgos de tormenta.

¡Es difícil imaginar que consolas PlayStation 5 y teléfonos iPhone 12 se encuentren en el fondo del mar!

La pandemia de Covid-19 ha dejado una lección preocupante: las cadenas globales de suministros en varias industrias, pueden interrumpirse con facilidad. Quizás sea necesario replantear su funcionamiento y aplicar otras estrategias como la generación de nuevos centros de producción a nivel mundial, más cercanos, con mayor diversidad de proveedores y crear nuevas cadenas de suministros más cortas, para garantizar el abastecimiento y tener la seguridad de contar con los suministros básicos.

La crisis de los semiconductores podría ser una gran oportunidad para que los países puedan mejorar y garantizar en el futuro, un mejor funcionamiento de las cadenas de distribución de suministros.

## REFERENCIAS:

Ashworth, L. (27 de abril de 2021). Thousands of containers are falling off ships. The Telegraph. <https://www.telegraph.co.uk>. Recuperado el día 25 de mayo de 2021, de <https://www.telegraph.co.uk/business/2021/04/27/thousands-containers-falling-ships/>

DW. (26 de febrero de 2021). La escasez de chips amenaza a las industrias. Deutsche Welle Made for minds. <https://www.dw.com/es>. Recuperado el día 22 de mayo de 2021, de <https://www.dw.com/es/la-escasez-de-chips-amenaza-a-las-industrias/av-56708861>

Kelion, L. (10 de febrero de 2021). Escasez de microchips: por qué hay una crisis de semiconductores y cómo puede afectarte. BBC News Mundo. <https://www.bbc.com/>. Recuperado el día 20 de mayo de 2021, de <https://www.bbc.com/mundo/noticias-55955119>

Miranda, L. (4 de junio de 2020). ¿Se retrasa la PlayStation 5? La web de Sony ya no muestra la fecha de lanzamiento. <https://hipertextual.com>. Recuperado el día 25 de mayo, de 2021 de <https://hipertextual.com/2020/06/ps5-precio-fecha-lanzamiento-playstation-5-retraso>

Staff e-Vector. (5 de abril de 2021). El Armagedón de los chips, e-Vector Plataforma Digital Financiera. <https://tumanejalo.com.mx/> blog/. Recuperado el día 20 de mayo de 2021, de <https://tumanejalo.com.mx/blog/el-armagedon-de-los-chips/>

Zurita, I. M. (29 de abril de 2021). El 'Armagedón del silicio' y los chips caídos por la borda, Gamereactor. <https://www.gamereactor.es/>. Recuperado el día 24 de mayo de 2021, de <https://www.gamereactor.es/el-armagedon-del-silicio-y-los-chips-caidos-por-la-borda/>

# Video del 80 Aniversario del Instituto de Química

Diseño y Edición: Hortensia Segura Silva y José Jorge Corella López



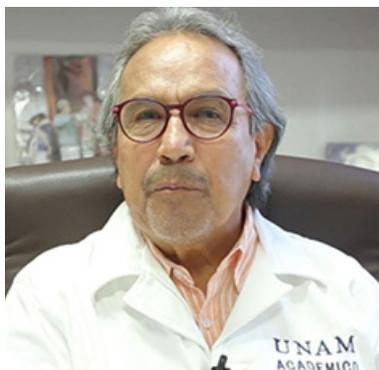
El Instituto de Química fue inaugurado el 5 de abril de 1941, sus instalaciones se ubicaron en el terreno que ocupaba la entonces Escuela Nacional de Ciencias Químicas, hoy Facultad de Química, en la zona de Tacuba. Su misión inicial fue organizar la investigación científica en su campo en México, para institucionalizarla.

El video que se presentó en la ceremonia inaugural contó con la participación y entrevista de académicos, técnicos, estudiantes, ex directores, investigadores eméritos que narraron distintos aspectos de la historia del IQ-UNAM. Por las condiciones de la pandemia gran parte del material fue grabado en sesiones de Zoom. Agradecemos a todos los que colaboraron en este proyecto, entre los que destacan para la edición Lic. Jorge Corella López, la Mtra. Hortensia Segura Silva que diseñó el concepto y coordinó las entrevistas, (así como la parte gráfica y de recopilación del material). El video fue posible con la participación de todos los investigadores, técnicos, estudiantes y personal de apoyo de las distintas áreas.



# Graduados en el IQ

## Primer Semestre del año



SAULO CÉSAR ROSALES  
AMEZCUA

**Fecha de examen:** 7 de enero de 2021.  
**Tesis:** *Síntesis de imidazo[1,5-a]piridinas a partir de L-aminoácidos.*  
**Grado:** Maestro en Ciencias Químicas  
**Asesor:** Dr. Cecilio Álvarez Toledano  
**Lugar:** Examen vía remota por ZOOM.

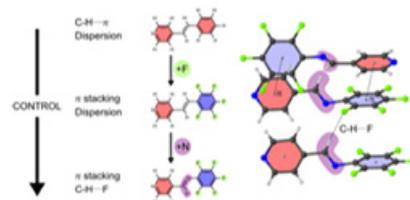
### REGISTRO TESIUNAM



EVERARDO JAIME  
ADÁN

**Fecha de examen:** 12 de enero de 2021.  
**Tesis:** *Análisis estructural de una serie de perhalofenilpiridinilmetaniminas y algunos cristales multicomponente con ácidos benzoicos p-sustituídos.*  
**Grado:** Doctor en Ciencias Químicas.  
**Asesor:** Dr. Jesús Valdés Martínez.  
**Lugar:** Examen vía remota por ZOOM.

### REGISTRO TESIUNAM





AZUCENA CAMPIRÁN MARTÍNEZ

Fecha de examen: 8 de enero de 2021.  
Tesis: *Síntesis y estudio estructural de sistemas homomultimetálicos de aluminio y galio derivados de bis(oxofosfinoil)diaminas.*  
Grado: Doctora en Ciencias Químicas.  
Asesor: Dra. Mónica Mercedes Moya Cabrera.  
Lugar: Examen vía remota por ZOOM.

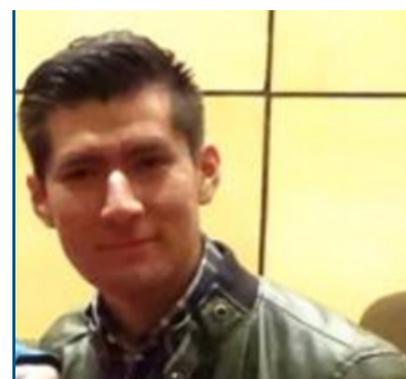
### REGISTRO TESIUNAM



IRVING OSIEL CASTILLO RODRÍGUEZ

Fecha de examen: enero de 2021.  
Tesis: *Diseño y síntesis de nanofármacos dendríticos anticancerígenos.*  
Grado: Maestro en Ciencias Químicas.  
Asesor: Dr. Marcos Martínez García.  
Lugar: Examen vía remota por ZOOM.

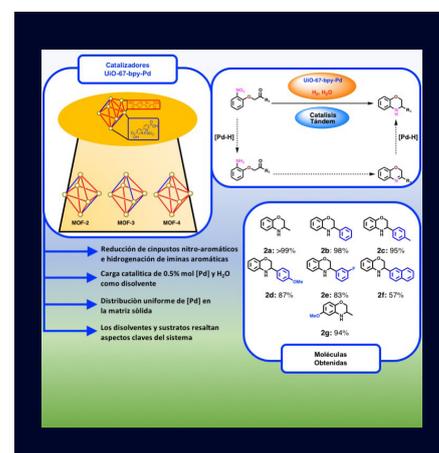
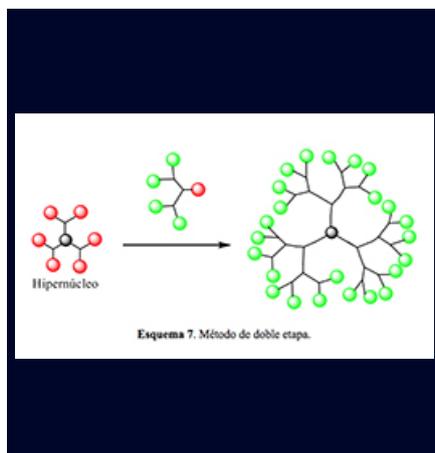
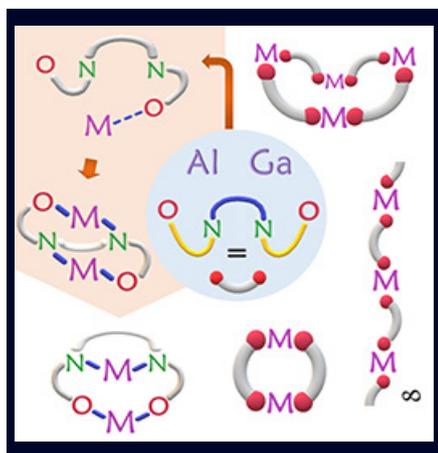
### REGISTRO TESIUNAM

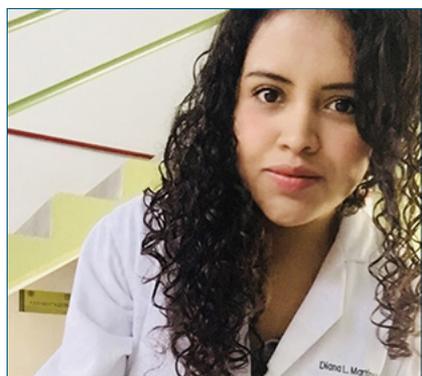


JUAN MANUEL CAMPOS CERÓN

Fecha de examen: 14 de enero de 2021.  
Tesis: *Actividad Catalítica del MOF UIO-67-BPY en la Síntesis de Benzoxazinas por Medio de una Reacción Támden.*  
Grado: Maestro en Ciencias Químicas.  
Asesor: Dr. Manuel José Amézquita Valencia.  
Lugar: Examen vía remota por ZOOM.

### EXAMEN GENERAL





DIANA LAURA  
MARTÍNEZ ZEPEDA

**Fecha de examen:** 19 de enero de 2021.

**Tesis:** Estudio de la complejación de aniones dicarboxilatos y oxoaniones en tiras reveladoras cromogénicas basados en complejos de Zn (II) y Cu (II).

**Grado:** Maestra en Ciencias Químicas.

**Asesor:** Dr. Alejandro Dorazco González.

**Lugar:** Examen vía remota por ZOOM.

REGISTRO EN PROCESO



NORBERTO GONZÁLEZ  
MOJICA

**Fecha de examen:** 5 de febrero de 2021.

**Tesis:** Síntesis de pirazinonas tricíclicas por medio de una reacción de UGI.

**Grado:** Maestro en Ciencias Químicas.

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

**Lugar:** Examen vía remota por ZOOM.

REGISTRO TESIUNAM



JOSÉ ABRAHAM  
COLÍN MOLINA  
(Mención Honorífica)

**Fecha de examen:** 12 de febrero de 2021.

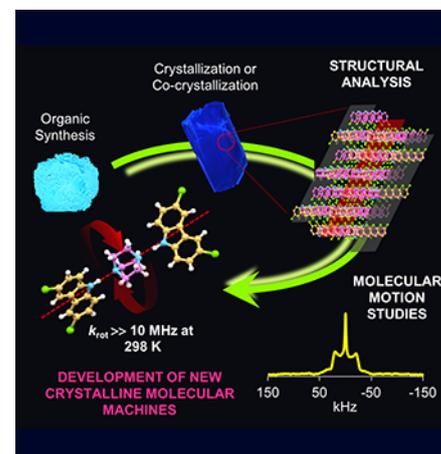
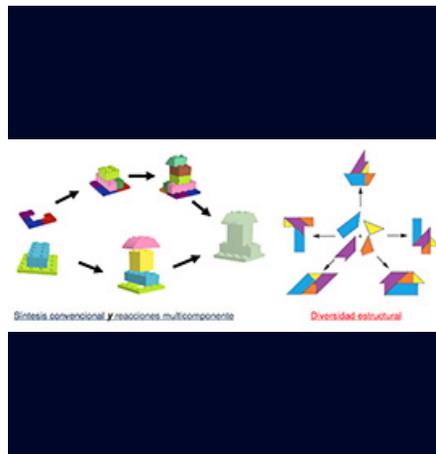
**Tesis:** Hacia la construcción de máquinas moleculares basadas en derivados de carbazol: relación entre la estructura cristalina y el movimiento rotacional intramolecular.

**Grado:** Doctor en Ciencias Químicas.

**Asesor:** Dr. Braulio Rodríguez Molina.

**Lugar:** Examen vía remota por ZOOM.

REGISTRO TESIUNAM



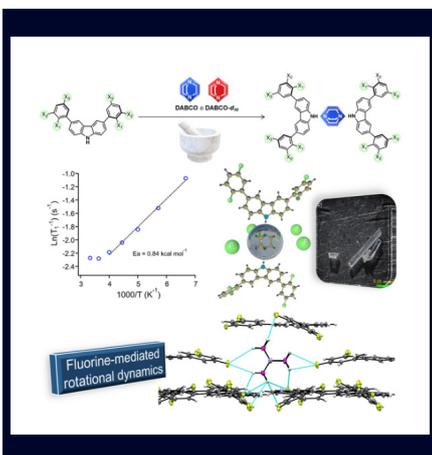


ARMANDO NAVARRO  
HUERTA  
(Mención Honorífica)

Fecha de examen: 15 de febrero de 2021.  
Tesis: *Síntesis de rotores moleculares cristalinos con difluorofenilcarbazol y estudio de su influencia estructural sobre la dinámica de DABCO.*

Grado: Maestro en Ciencias Químicas.  
Asesora: Dr. Braulio Rodríguez Molina.  
Lugar: Examen vía remota por ZOOM.

#### REGISTRO TESIUNAM



JUAN PABLO  
TORRES MEDICIS

Fecha de examen: 17 de febrero de 2021.  
Tesis: *Aislamiento y elucidación estructural de los metabolitos secundarios de la salvia gesneriiflora y S. Guevarae, implicaciones quimiotoxonómicas.*

Grado: Maestro en Ciencias Químicas.  
Asesor: Dr. Baldomero Esquivel Rodríguez.  
Lugar: Examen vía remota por ZOOM.

#### REGISTRO TESIUNAM

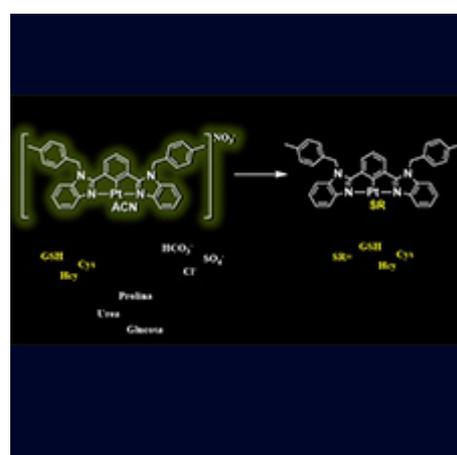


OSWALDO ALEJANDRO  
VIVIANO POSADAS

Fecha de examen: 18 de febrero de 2021.  
Tesis: *Reconocimiento de cisteína, homocisteína y glutatión basado en un complejo catiónico luminiscente de platino(II), síntesis y estudios espectroscópicos.*

Grado: Maestro en Ciencias Químicas.  
Asesor: Dr. Alejandro Dorazco González.  
Lugar: Examen vía remota por ZOOM.

#### REGISTRO TESIUNAM





ANDRÉS CAMILO RESTREPO ACEVEDO

Fecha de examen: 22 de febrero de 2021.  
Tesis: *Síntesis de complejos de rutenio con ligandos derivados de la protoporfirina IX*  
Grado: Maestro en Ciencias Químicas.  
Asesor: Dr. Ronan Le Lagadec.  
Lugar: Examen vía remota por ZOOM.

REGISTRO TESIUNAM



JOSÉ JULIÁN MEJÍA ALEMÁN

Fecha de examen: 25 de febrero de 2021.  
Tesis: *Diseño y síntesis de rotores moleculares con regioisomerismo de cadena lateral para evaluar interacciones areno-perfluoroareno.*  
Grado: Maestro en Ciencias Químicas.  
Asesor: Dr. Braulio Rodríguez Molina.  
Lugar: Examen vía remota por ZOOM.

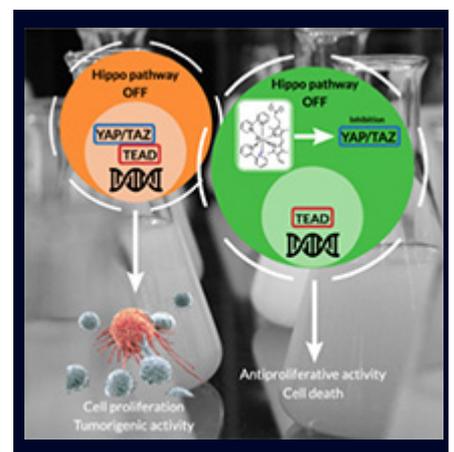
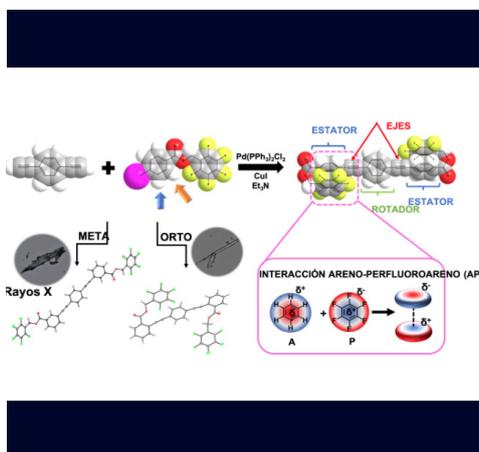
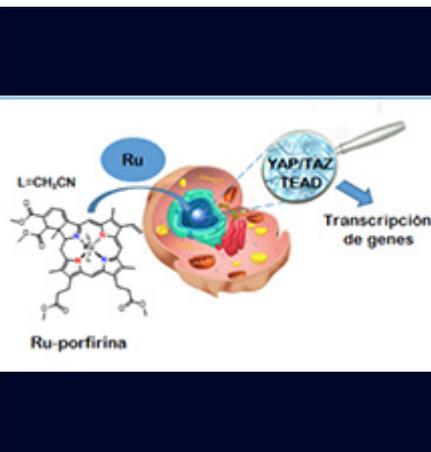
REGISTRO TESIUNAM

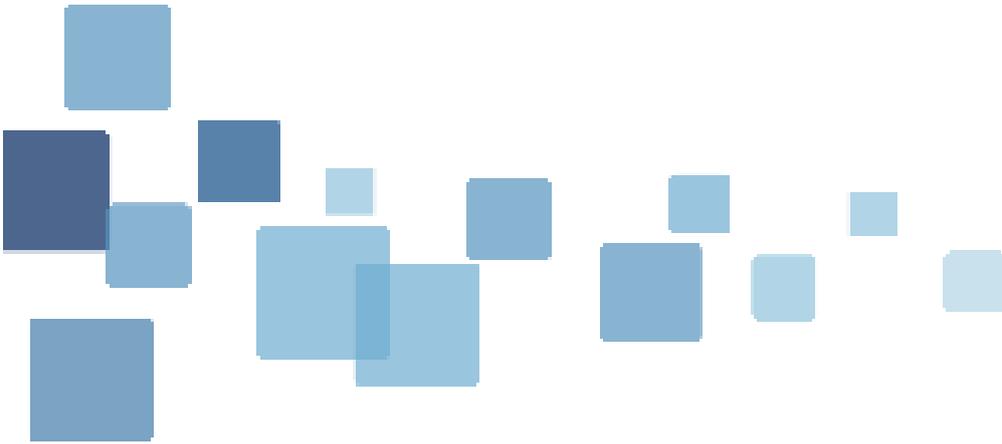


MARÍA ISABEL MURILLO RODRÍGUEZ

Fecha de examen: 26 de febrero de 2021.  
Tesis: *Síntesis de complejos ciclometalados de rutenio con derivados de la verteporfina.*  
Grado: Maestra en Ciencias Químicas.  
Asesor: Dr. Ronan Le Lagadec.  
Lugar: Examen vía remota por ZOOM.

REGISTRO TESIUNAM





LUIS JOSHUA  
HERNÁNDEZ BENÍTEZ  
(Mención Honorífica)

Fecha de examen: 8 de marzo de 2021.

Tesis: Estudio de las propiedades de una celulasa endógena del abulón rojo (*Haliotis rufescens*).

Grado: Maestro en Ciencias Bioquímicas.

Asesora: Dra. Adela Rodríguez Romero

Lugar: Examen vía remota por ZOOM.

REGISTRO TESIUNAM



IVÁN JONATHAN  
BAZANY RODRÍGUEZ

Fecha de examen: 19 de marzo de 2021.

Tesis: Quimiosensores fluorescentes para nucleótidos, neurotransmisores y analitos modelo de hemoglobina glicosilada basados en receptores bifuncionales de zinc (II)-boronato.

Grado: Doctor en Ciencias Químicas.

Asesor: Dr. Alejandro Dorazco González.

Lugar: Examen vía remota por ZOOM.

REGISTRO TESIUNAM



JULIANA JARAMILLO  
RAMÍREZ

Fecha de examen: 22 de marzo de 2021.

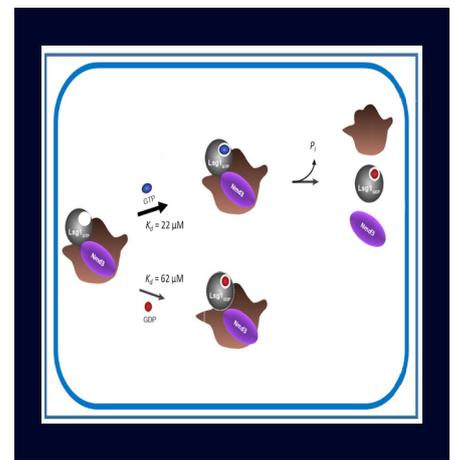
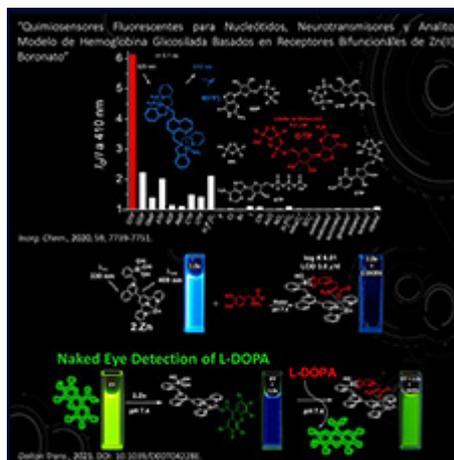
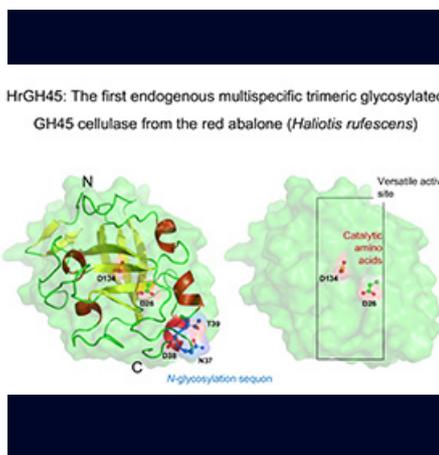
Tesis: Estudios del reconocimiento de nucleótidos de guanina por la GTPasa ribosomal LSG1/KRE35.

Grado: Doctora en Ciencias Químicas.

Asesora: Dra. Nuria Victoria Sánchez Puig.

Lugar: Examen vía remota por ZOOM.

REGISTRO TESIUNAM





ERICK RAMÍREZ  
ZENTENO

Fecha de examen: 9 de abril de 2021.

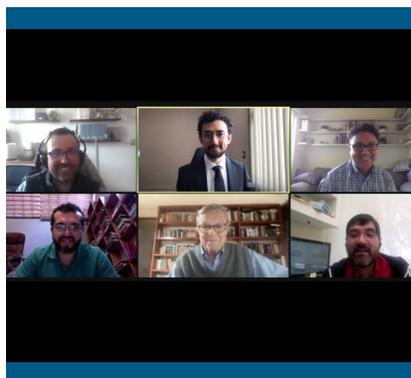
Tesis: *Estudio de complejos bioinspirados de cobre con ligandos heterocíclicos nitrogenados.*

Grado: Doctor en Ciencias Químicas.

Asesor: Dr. Ivan Castillo Pérez.

Lugar: Examen vía remota por ZOOM.

REGISTRO TESIUNAM



DAVID IGNACIO  
RAMÍREZ PALMA

Fecha de examen: 15 de abril de 2021.

Tesis: *Caracterización de la interacción metal-ligante y fenómenos de transferencia electrónica por medio de la densidad de espín y su laplaciano.*

Grado: Doctor en Ciencias Químicas.

Asesor: Dr. Fernando Cortés Guzmán.

Lugar: Examen vía remota por ZOOM.

REGISTRO TESIUNAM



FABIOLA ANGÉLICA  
LÓPEZ HUERTA  
(Mención Honorífica)

Fecha de examen: 7 de mayo de 2021.

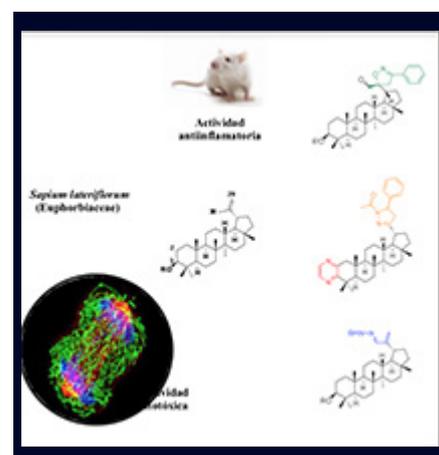
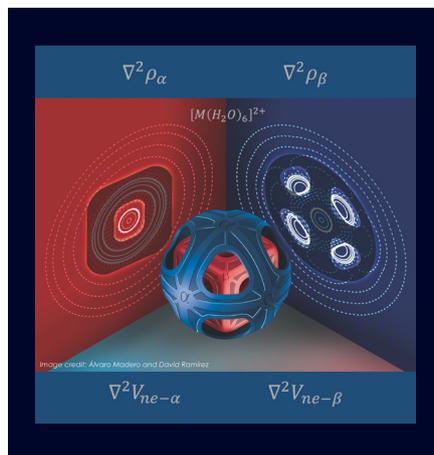
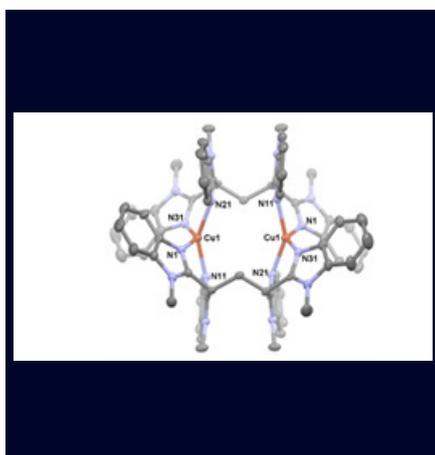
Tesis: *Semisíntesis y evaluación biológica de azoderivados heterocíclicos de triterpenos pentacíclicos de la familia Euphorbiaceae.*

Grado: Doctora en Ciencias Químicas.

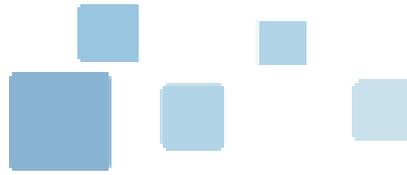
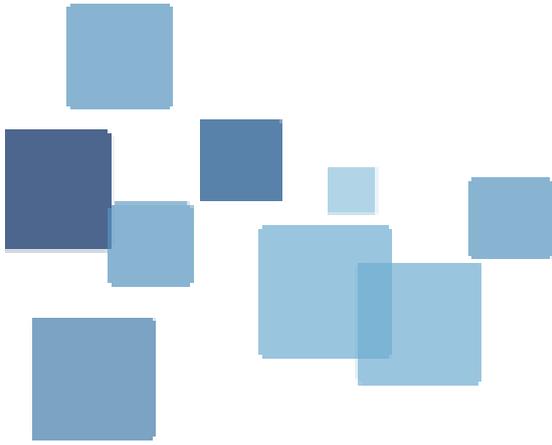
Asesor: Dr. Guillermo Delgado Lamas.

Lugar: Examen vía remota por ZOOM.

REGISTRO TESIUNAM







YUSVEL SIERRA  
GÓMEZ



GUILLERMO LEOBARDO  
RODRÍGUEZ ACOSTA



JOSÉ GUADALUPE  
ROSAS JIMÉNEZ

**Fecha de examen:** 21 de mayo de 2021.  
**Tesis:** *Caracterización Funcional y Estructural de Enzimas Glicohidrolíticas Involucradas en los Mecanismos de Defensa de Agave azul tequilana.*  
**Grado:** Doctor en Ciencias Biomédicas.  
**Asesora:** Dra. Adela Rodríguez Romero.  
**Lugar:** Examen vía remota por ZOOM.

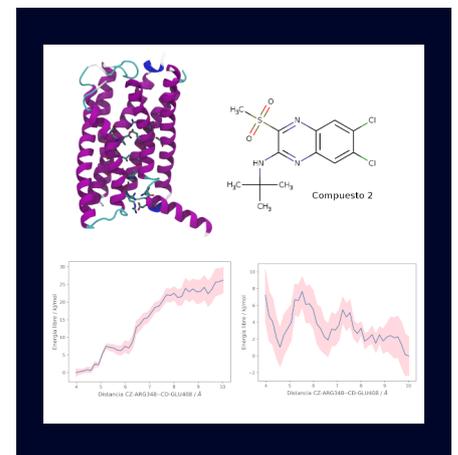
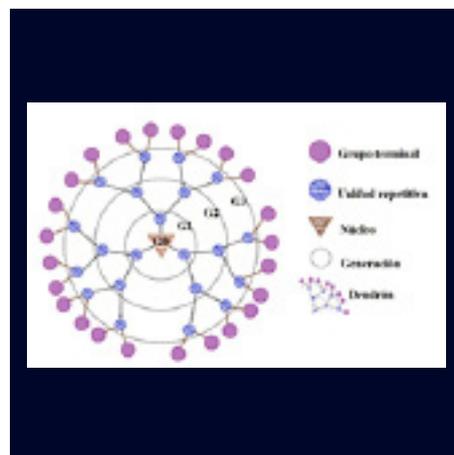
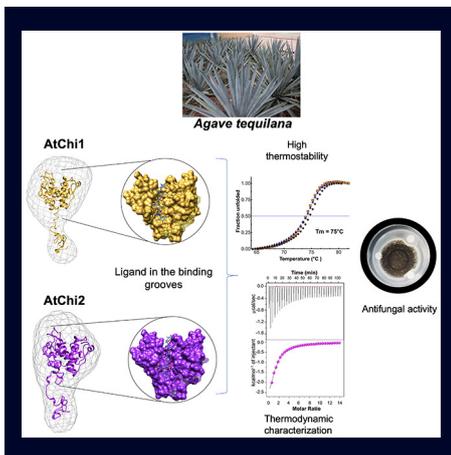
### REGISTRO TESIUNAM

**Fecha de examen:** junio de 2021.  
**Tesis:** *Diseño y síntesis de porfirinas asimétricas dendríméricas.*  
**Grado:** Maestro en Ciencias Químicas.  
**Asesor:** Dr. Marcos Martínez García.  
**Lugar:** Examen vía remota por ZOOM.

### REGISTRO TESIUNAM

**Fecha de examen:** 8 de junio de 2021.  
**Tesis:** *Simulaciones de dinámica molecular de la modulación alostérica en el receptor para péptido similar a glucagon de tipo 1 (GLP-1R).*  
**Grado:** Maestro en Ciencias Químicas.  
**Asesor:** Dra. Karina Martínez Mayorga.  
**Lugar:** Examen vía remota por ZOOM.

### REGISTRO TESIUNAM





ZAIRA TAVARES  
SANTAMARÍA

Fecha de examen: 9 de junio de 2021.

Tesis: *Actividad Antitumoral in vivo de argentinina A, un triterpeno de tipo cicloartano aislado de Parthenium argentatum.*

Grado: Doctora Ciencias Bioquímicas.

Asesor: Dr. Mariano Martínez Vázquez.

Lugar: Examen vía remota por ZOOM.

#### REGISTRO TESIUNAM



MARIO CASTAÑÓN  
GARCÍA

Fecha de examen: 11 de junio de 2021.

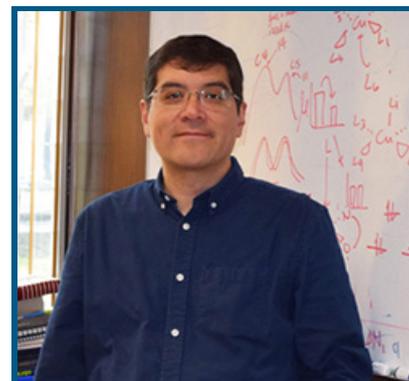
Tesis: *Desarrollo de una metodología de síntesis de 3,3'-bicumarinas.*

Grado: Maestro en Ciencias Químicas.

Asesor: Dr. Luis Demetrio Miranda Gutiérrez.

Lugar: Examen vía remota por ZOOM.

#### REGISTRO TESIUNAM



LUIS EDUARDO  
OROZCO VALDESPINO

Fecha de examen: 24 de junio de 2021.

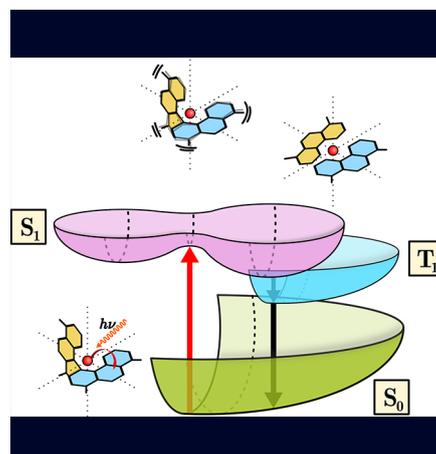
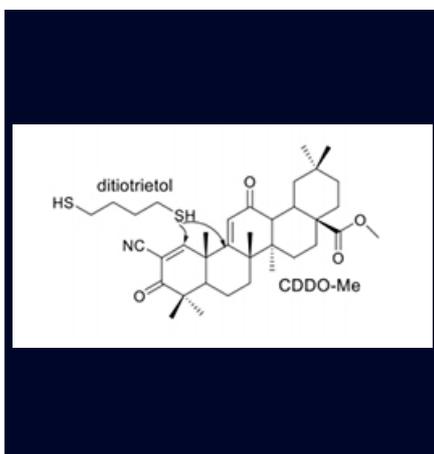
Tesis: *"Efecto del sustituyente en el cambio geométrico fotoinducido de compuestos de coordinación de cobre (I)".*

Grado: Maestro en Ciencias Químicas.

Asesor: Dr. Fernando Cortés Guzmán

Lugar: Examen vía remota por ZOOM.

#### REGISTRO TESIUNAM





ENRIQUE AGUILAR  
RAMÍREZ

Fecha de examen: 27 de julio de 2021.

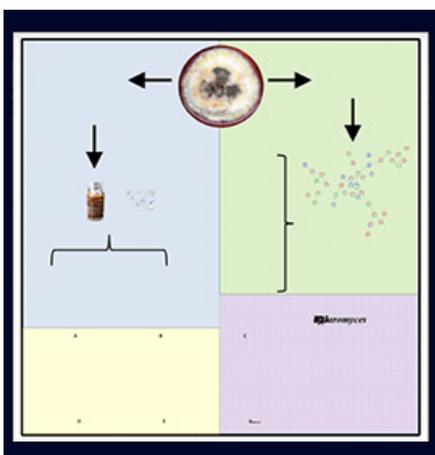
Tesis: Aislamiento y síntesis parcial de análogos de duclauxina: evidencias teórico-experimentales de su interacción con la proteína tirosina fosfatasa 1B (hPTP1B<sub>1-400</sub>).

Grado: Maestro en Ciencias Químicas.

Asesor: Dr. José Alberto Rivera Chávez.

Lugar: Examen vía remota por ZOOM.

## REGISTRO TESIUNAM



WILLIAM EFRÉN  
MEZA MORALES

Fecha de examen: 29 de julio de 2021.

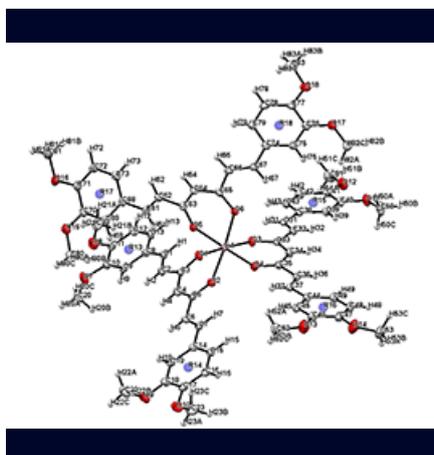
Tesis: Estudio de la relación metal-ligante de curcumina y curcuminoides.

Grado: Doctor en Ciencias Químicas.

Asesor: Dr. Raúl G. Enríquez Habib.

Lugar: Examen vía remota por ZOOM.

## REGISTRO TESIUNAM



ANDRÉS BORJA  
MIRANDA

Fecha de examen: 4 de agosto de 2020.

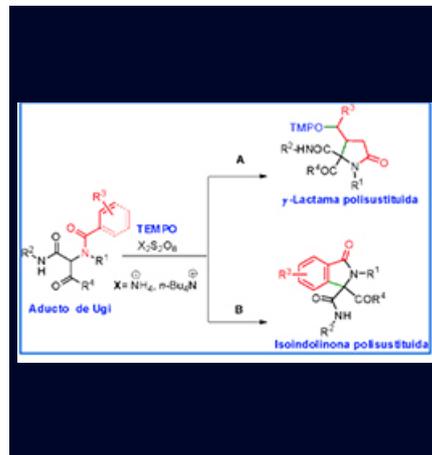
Tesis: Empleo de persulfatos como generadores de radicales libres en sistemas 1,3-dicarbonílicos y su empleo en el estudio sintético del núcleo tricíclico básico de las Yezo'otogirinas A-C.

Grado: Doctor en Ciencias Químicas.

Asesora: Dr. Luis Ángel Polindara García.

Lugar: Examen vía remota por ZOOM.

## REGISTRO TESIUNAM





JENNIFER ROCIO  
MUÑOZ PABÓN

**Fecha de examen:** 5 de agosto de 2020.

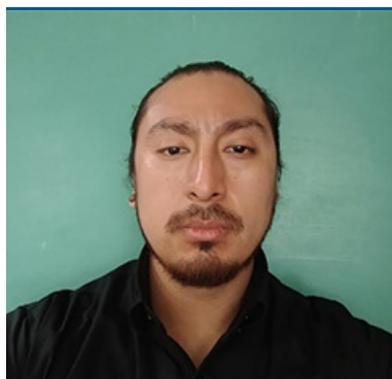
**Tesis:** *Funcionalización C(sp<sup>3</sup>)-H radicalaria en aductos de Ugi empleando persulfatos: síntesis de núcleos de importancia biológica.*

**Grado:** Maestra en Ciencias Químicas.

**Asesor:** Dr. Luis Ángel Polindara García.

**Lugar:** Examen vía remota por ZOOM.

## REGISTRO TESIUNAM



BALÚ CRUZ  
DELGADO

**Fecha de examen:** 5 de agosto de 2021.

**Tesis:** *Cuaternización de posiciones propargílico-bencílicas con electrófilos diversos.*

**Grado:** Doctor en Ciencias Químicas.

**Asesor:** Dr. Francisco Yuste López.

**Lugar:** Examen vía remota por ZOOM.

## REGISTRO TESIUNAM



VÍCTOR AUGUSTO  
MORENO MARTÍNEZ  
(Mención Honorífica)

**Fecha de examen:** 6 de agosto de 2021.

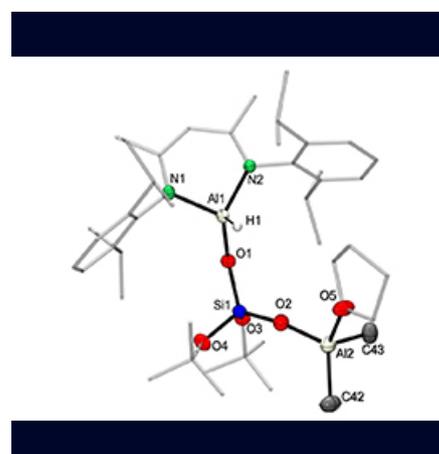
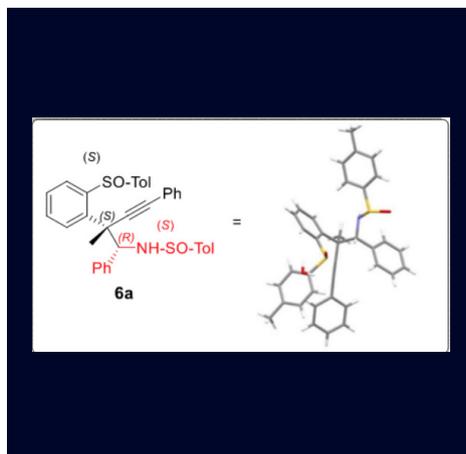
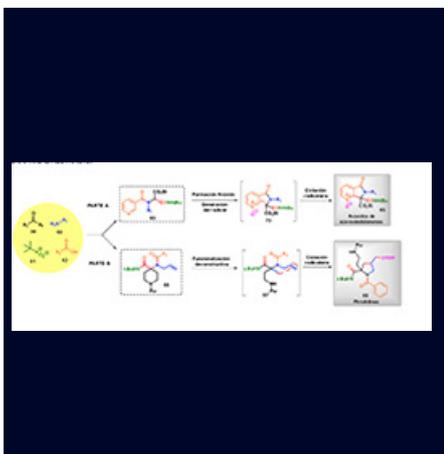
**Tesis:** *Silicatos y aluminosilicatos heterocíclicos moleculares como modelos de superficies modificadas.*

**Grado:** Doctor en Ciencias Químicas.

**Asesor:** Dr. Vojtech Jancik.

**Lugar:** Examen vía remota por ZOOM.

## REGISTRO TESIUNAM





ADRIÁN MARCELO  
FRANCO VÁSQUEZ.

**Fecha de examen:** 6 de agosto de 2021.

**Tesis:** *Aislamiento, identificación y caracterización de fosfolipasas A2 del veneno de serpiente Lachesis acrochorda.*

**Grado:** Maestro Ciencias Bioquímicas.

**Asesor:** Dr. Roberto Arreguín Espinosa de los Monteros.

**Lugar:** Examen vía remota por ZOOM.

## REGISTRO TESIUNAM

