



PRESENTACIONES DE ALUMNOS (1ER DÍA)

04 ● NOVIEMBRE ● 2020

14:00 – 16:00 H

Presentación 01 14:15 a 14:30 h

Título del trabajo: “Design, synthesis and evaluation of 2,4-diaminoquinazoline derivatives as potential tubulin polymerization inhibitors”

Autores: Frida S. Herrera-Vázquez, Félix Matadamas-Martínez, Rodrigo Aguayo-Ortiz, Laura Dominguez, Teresa Ramírez-Apan, Lilián Yépez-Mulia y Francisco Hernández-Luis

Institución de procedencia: Facultad de Química, UNAM

Resumen del trabajo: Microtubules are polymers of α/β -tubulin that have shown to be key therapeutic targets for cancer treatment. Nocodazole (NZ) and colchicine (COL) are well-known anti-tubulin agents that have close binding sites in the β -tubulin. Herein, we designed and synthesized a set of nine 2,4-diaminoquinazoline derivatives that could occupy the NZ/COL binding site. Our results demonstrated that two of the compounds exert antiproliferative activity by inhibiting tubulin polymerization. Moreover, a possible binding mode of these compounds in the pocket was determined using computational approaches. To our knowledge, this is the first report of non-*N*-substituted 2,4-diaminoquinazoline derivatives with tubulin polymerization inhibitory activity.

Correo electrónico del ponente: herrerafrida@hotmail.com

Presentación 02 14:30 a 14:45 h

Título del trabajo: “Estudios *in silico* y síntesis de derivados del ácido glicirretínico como inhibidores de la enzima PTP1B para el tratamiento de la Diabetes mellitus y obesidad”

Autores: Ledy Cheyenne De la Cruz Martínez, Francisco Palacios Espinosa, Martín González Andrade, Constanza Duran Becerra, Jaime Pérez Villanueva, Olivia Soria Arteche y Francisco Cortés Benítez

Institución de procedencia: UAM-Xochimilco

Resumen del trabajo: En este trabajo, se presenta la síntesis de derivados del ácido glicirretínico fusionados a un anillo de pirazol. Estos triterpenos semisintéticos fueron diseñados con la intención de inhibir a la enzima Proteína Tirosina Fosfatasa 1B (PTP1B), la cual, está involucrada en enfermedades como la diabetes mellitus 2 y la obesidad. Los estudios de acoplamiento molecular de los derivados sintetizados mostraron que éstos se unen tanto al sitio catalítico de la enzima como al sitio alostérico vecino con energías libres de Gibbs menores a -7 kcal/mol, por lo que el siguiente paso es determinar su actividad inhibitoria en estudios *in vitro*.

Correo electrónico del ponente: ladyquimica221095@gmail.com

Presentación 03

14:45 a 15:00 h

Título del trabajo: “Diseño y síntesis de derivados indólicos del ácido glicirretínico como inhibidores de la PTP1B para el tratamiento de diabetes y obesidad”

Autores: Constanza Duran Becerra, Juan Francisco Palacios Espinosa, Jaime Pérez Villanueva, Olivia Soria Arteche y Juan Francisco Cortés Benítez

Institución de procedencia: UAM-Xochimilco

Resumen del trabajo: La inhibición de la Proteína Tirosina Fosfatasa 1B (PTP1B) es de interés terapéutico para el tratamiento de la diabetes tipo 2 y obesidad. Un inhibidor del sitio catalítico de la PTP1B es el 5-carboxi-6-oxalilamino-(1H)-indol (COI), mientras que un inhibidor de un sitio vecino al catalítico es el ácido glicirretínico (AG). En este trabajo se sintetizaron cuatro compuestos híbridos con el esqueleto triterpénico del AG y el núcleo indólico de COI. También se realizaron estudios de docking donde se observó que los nuevos derivados tienen una mejor energía de afinidad por la PTP1B que la mostrada por el AG y COI.

Correo electrónico del ponente: 2163025430@alumnos.xoc.uam.mx

Presentación 04

15:00 a 15:15 h

Título del trabajo: “DNA Methyltransferase Inhibitors with Novel Chemical Scaffolds”

Autores: K. Eurídice Juárez-Mercado, Fernando D. Prieto-Martínez, Norberto Sánchez-Cruz, Andrea Peña-Castillo, Diego Prada-Gracia y José L. Medina-Franco

Institución de procedencia: Facultad de Química, UNAM

Resumen del trabajo: Los inhibidores de las metiltransferasas de ADN (DNMTs) son compuestos atractivos para el descubrimiento de fármacos epigenéticos, debido a que pueden ser posibles tratamientos contra el cáncer. En este trabajo, reportamos cinco moléculas con nuevos núcleos bases (*Scaffolds*) que presentan actividad inhibitoria contra DNMT1, caracterizadas en ensayos de inhibición enzimática. Finalmente, empleamos métodos *in silico*, para evaluar las posibles interacciones proteína-ligando a nivel molecular comparándolas con los resultados experimentales obtenidos en las pruebas bioquímicas de las moléculas bioactivas.

Correo electrónico del ponente: kaeuridice@gmail.com

Presentación 05

15:15 a 15:30 h

Título del trabajo: “Extracción de sulforafano a partir de la *Brassica oleracea var. italica*”

Autores: Sandra Jazmín Pérez Hernández, Nadia Jazmín González González y Ángel Eduardo Márquez Ortega

Institución de procedencia: Tecnológico de Estudios Superiores de Chimalhuacán

Resumen del trabajo: *Brassica oleracea var. italica* posee un compuesto bioactivo denominado sulforafano, el cual actúa ante la gastritis, úlcera gástrica y cáncer de estómago. Este compuesto reduce el tamaño del tumor al actuar como activador del factor de transcripción Nrf2. El sulforafano no presenta efectos adversos; sin embargo, es necesario llevar a cabo un estudio extenso para conocer las dosis máximas para su administración. Esta investigación postula al sulforafano como un posible candidato en el desarrollo de nuevos agentes antimicrobianos que hagan frente a la infección por *Helicobacter pylori* y su empleo en otras líneas de investigación del área químico farmacéutico.

Correo electrónico del ponente: ethelmiranamali@gmail.com

Presentación 06

15:30 a 15:45 h

Título del trabajo: "Diseño, síntesis y evaluación biológica de esteroides benzofusionados"**Autores:** [Ana Isabel Ahuja Casarín](#), Penélope Merino Montiel, Socorro Meza Reyes y Sara Montiel Smith**Institución de procedencia:** Benemérita Universidad Autónoma de Puebla**Resumen del trabajo:** Considerando la gran importancia que tienen actualmente los productos naturales, nos planteamos sintetizar derivados a partir de 3 esqueletos esteroidales (estrona, androsterona y dehidroandrosterona), ya que estos presentan interesantes propiedades farmacológicas, decidimos sintetizar compuestos de tipo benzotiazolina, benzoxazolina y benzimidazolina, a su vez, se ha demostrado que los heterociclos nitrogenados presentan múltiples actividades biológicas debido a su amplia unión a diversas biomoléculas, dichos compuestos fueron sintetizados sobre el carbono 17 del esqueleto esteroideal, posición que ha demostrado buenos resultados al ser modificada, una vez sintetizados los compuestos se realizó su evaluación sobre 6 líneas celulares cancerosas, observando resultados interesantes.**Correo electrónico del ponente:** aisabel_ac@hotmail.com**Presentación 07**

15:45 a 16:00 h

Título del trabajo: "Diseño, síntesis y evaluación biológica de nuevos agentes tricomonocidas"**Autores:** [Karen Rodríguez-Villar](#), Lilián Yépez-Mulia, Alicia Hernández-Campos, Juan Francisco Palacios-Espinosa, Juan Francisco Cortés-Benítez, Olivia Soria-Arteche y Jaime Pérez-Villanueva**Institución de procedencia:** UAM-Xochimilco**Resumen del trabajo:** Tricomoniasis es una ITS no viral, causada por *Trichomonas vaginalis*, asociada a infertilidad, cáncer cervical, riesgo de contraer VIH, complicaciones durante el embarazo y muerte neonatal. El tratamiento farmacológico es limitado, siendo metronidazol el fármaco de primera elección; sin embargo, la aparición de cepas resistentes va en aumento. Con la finalidad de encontrar nuevos agentes tricomonocidas, se han diseñado diez derivados 2,3-difenil-1*H*-indazol y 1*H*-pirazol, basados en el reemplazo bioisostérico y simplificación molecular. Los compuestos sintetizados fueron evaluados *in vitro* contra tres cepas de *T. vaginalis*. La mayoría de los compuestos mostraron actividad tricomonocida, siendo algunos más activos que metronidazol.**Correo electrónico del ponente:** gkarenrodv@hotmail.com



PRESENTACIONES DE ALUMNOS (2^{DO} DÍA)

05 ● NOVIEMBRE ● 2020

14:00 – 16:00 H

Presentación 08 14:15 a 14:30 h

Título del trabajo: “Reposicionamiento de moléculas con potencial actividad senolítica mediante cribado virtual basado en estructura”

Autores: Kevin Samael Olascoaga Del Angel, Norma Edith López Díaz Guerrero, Jaime Pérez Villanueva y Mina Konigsberg Fainstein

Institución de procedencia: UAM-Xochimilco

Resumen del trabajo: Debido a la resistencia anti-apoptótica las células senescentes (CS) se acumulan en los órganos y tejidos con el paso del tiempo, esta acumulación está asociada con diferentes enfermedades crónico – degenerativas. Haciendo uso de redes de co-expresión y métodos de Montecarlo se descubrieron genes de resistencia a la muerte celular en un modelo de senescencia inducida por estrés oxidante en células epiteliales de próstata, las proteínas codificadas por estos genes se proponen como blancos moleculares sobre los cuales dirigir moléculas pequeñas que serán identificadas mediante métodos computacionales con el objetivo de inducir muerte celular de manera selectiva a las CS.

Correo electrónico del ponente: olaskuaga@gmail.com

Presentación 09 14:30 a 14:45 h

Título del trabajo: “Síntesis de derivados de indazol diseñados a partir de celecoxib y combretastatina A4”

Autores: Jovita Lucero Ruiz García, Jaime Pérez Villanueva, Félix Matadamas Martínez, Juan Francisco Cortés Benítez, Juan Francisco Palacios Espinosa y Olivia Soria Arteché

Institución de procedencia: UAM-Xochimilco

Resumen del trabajo: El cáncer es la segunda causa de muerte a nivel mundial según datos de la Organización Mundial de la Salud. Actualmente, uno de los tratamientos en quimioterapia es el uso de fármacos antimetabólicos, estos tienen como diana a la tubulina, proteína que forma a los microtúbulos. Estos son de gran importancia, debido a que participan en el proceso de mitosis, por lo que un descontrol en el proceso conlleva a la muerte celular. En el presente trabajo se sintetizaron compuestos híbridos derivados de combretastatina A4, 2,3-difenil-2H-indazol y celecoxib, para ser evaluados sobre tubulina y líneas celulares de cáncer.

Correo electrónico del ponente: jlucero.rgarcia@gmail.com

Presentación 10

14:45 a 15:00 h

Título del trabajo: “Síntesis de 2-fenil-2H-indazoles fluorados y su actividad giardicida, amebicida y tricomonocida”

Autores: Edgar Abraham Quintana Salazar, Lilián Yépez Mulia, Karen Rodríguez Villar, Juan Francisco Palacios Espinosa, Juan Francisco Cortés Benítez, Olivia Soria Arteché y Jaime Pérez Villanueva

Institución de procedencia: UAM-Xochimilco

Resumen del trabajo: Las enfermedades infecciosas causadas por protozoarios son un grave problema de salud pública, que afectan principalmente a países en vías de desarrollo, catalogándose como enfermedades tropicales desatendidas. Las más comunes son las causadas por *Entamoeba histolytica*, *Giardia intestinalis* y *Trichomonas vaginalis*. El presente trabajo incluye el diseño, síntesis y evaluación de una serie de seis derivados del 2-fenil-2H-indazol sustituidos con trifluorometilo y flúor contra tres protozoarios. Los compuestos sintetizados se obtuvieron con buenos rendimientos y mostraron mayor actividad antiprotozoaria que los fármacos de referencia, siendo los compuestos con grupo CF₃ los más activos.

Correo electrónico del ponente: edgarqsl2811@gmail.com

Presentación 11

15:00 a 15:15 h

Título del trabajo: “Diseño basado en la estructura y síntesis de derivados del ácido litocólico como inhibidores de la proteína tirosin fosfatasa (PTP1B)”

Autores: Andrea Garrido Mendoza, Jaime Pérez Villanueva, Francisco Palacios Espinosa, Olivia Soria Arteché y Francisco Cortés Benítez

Institución de procedencia: UAM-Xochimilco

Resumen del trabajo: La enzima Proteína Tirosina Fosfatasa 1B (PTP1B) está involucrada en la progresión de obesidad y diabetes; así como accidentes cardiovasculares. El ácido litocólico (AL) es un ácido biliar que inhibe débilmente a esta enzima. En el presente trabajo, mediante estudios de acoplamiento molecular se determinó que la incorporación de bencilaminas a la posición C3 del AL incrementaban su afinidad por el sitio activo y un sitio alostérico vecino de la PTP1B. Con estos resultados, posteriormente se realizó la síntesis en 4 pasos de reacción de 6 derivados del AL con diferentes bencilaminas en la posición C3 con rendimientos moderados.

Correo electrónico del ponente: garrido.m.andrea@gmail.com

Presentación 12

15:15 a 15:30 h

Título del trabajo: “Síntesis de chalconas y su evaluación antifúngica contra *Candida albicans*”

Autores: Edith Vanessa Espinoza Galán, Karen Rodríguez Villar, Jaime Pérez Villanueva, Juan Francisco Cortés Benítez, Olivia Soria Arteché y Juan Francisco Palacios Espinosa

Institución de procedencia: UAM-Xochimilco

Resumen del trabajo: Los productos naturales son una fuente importante de moléculas bioactivas. El núcleo de chalcona es una estructura privilegiada en Química Farmacéutica y representa una alternativa importante para el descubrimiento de nuevos fármacos, su aislamiento de fuentes naturales es difícil y con bajos rendimientos; la alternativa para su obtención es por síntesis orgánica. En este trabajo reportamos la síntesis de siete chalconas con potencial actividad antifúngica sobre una cepa de *Candida albicans*. Las nuevas chalconas se sintetizaron con buenos rendimientos y la evaluación biológica mostró que la molécula VII posee buena actividad antifúngica, lo que nos alienta a seguir su estudio.

Correo electrónico del ponente: jpalacios@correo.xoc.uam.mx

Presentación 13

15:30 a 15:45 h

Título del trabajo: “Plataformas de predicción online como herramientas en la búsqueda de nuevos agentes antineoplásicos en especies medicinales del género *Cuphea*”

Autores: Viridiana Villanueva Castillo, Beatriz González Hidalgo, Sol Cristians Niizawa, Juan Francisco Cortés Benítez, Karen Rodríguez Villar, Edgar Abraham Quintana Salazar, Jaime Pérez Villanueva, Olivia Soria Arteché y Juan Francisco Palacios Espinosa

Institución de procedencia: UAM-Xochimilco

Resumen del trabajo: El cáncer es un problema de salud pública global, donde la búsqueda de nuevos fármacos es necesaria. En este contexto, el uso de herramientas quimioinformáticas en el análisis de moléculas son de gran utilidad para reducir tiempos de trabajo experimental y dirigir a ensayos específicos. En este trabajo utilizamos las plataformas SwissTargetPrediction y PASSOnline para analizar una base de metabolitos secundarios aislados de especies del género *Cuphea*. Se identificaron nueve blancos moleculares de interés, algunos de ellos relacionados con cáncer. Los resultados obtenidos se probarán como nuevos blancos terapéuticos para el desarrollo de estudios adicionales *in silico* e *in vitro*.

Correo electrónico del ponente: viryvc94@gmail.com

Presentación 14

15:45 a 16:00 h

Título del trabajo: “Estudios de metabolitos secundarios de *Pachira aquatica* y *Abelmoschus esculentus* mediante plataformas online de predicción”

Autores: Brenda Berenice Jerónimo Atanacio, Juan Francisco Cortés Benítez, Jaime Pérez Villanueva, María Teresa Núñez Cardona, Beatriz González Hidalgo, Karen Rodríguez Villar, Edgar Quintana Salazar, Olivia Soria Arteché y Juan Francisco Palacios Espinosa

Institución de procedencia: UAM-Xochimilco

Resumen del trabajo: Los productos naturales son una fuente potencial de metabolitos bioactivos para el tratamiento de enfermedades como la diabetes. En la búsqueda de nuevos fármacos, se utilizan distintos métodos como los asistidos por computadoras. Estos métodos resultan ser valiosos para identificar compuestos activos, optimizar recursos para su obtención, así como direccionar a un ensayo biológico apropiado. En este trabajo, se reporta el uso de plataformas de predicción para analizar una base de datos de compuestos aislados de *Pachira aquatica* y *Abelmoschus esculentus*. Se identificaron varios compuestos de ambas especies que interactúan con al menos 20 blancos moleculares relacionados con la Diabetes.

Correo electrónico del ponente: bberenice94@hotmail.com