

**DQ.0019.2024** Marzo 11, 2024

Dr. Román Linares Romero Presidente del Consejo Divisional de la División de Ciencias Básicas e Ingeniería PRESENTE



A través de este medio le solicito incluir en el orden del día de la próxima sesión del Consejo Divisional el informe sabático del Profesor José Alfonso Arroyo Reyna, del Área Académica de Biofisicoquímica del Departamento de Química. Dicho informe sabático comprende el período de 12 meses a partir del 30 de enero de 2023.

Agradezco su atención a esta solicitud y le envío un cordial saludo.

Atentamente Casa abierta al tiempo

Dr. Jorge Garza Olguín Jefe del Departamento de Química



## UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

# CONSEJO DIVISIONAL DE CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERIA INFORME DE PERÍODO SABÁTICO

DATOS GENERALES
Nombre del profesor: _José Alfonso Arroyo Reyna № empleado:09392
Departamento: QuímicaBiofisicoquímica
@xanum.uam.mx
Teléfono particulariixtensión UAM-I: E-mai E-mai
DATOS DEL PERÍODO SABÁTICO SOLICITADO
Nº meses solicitados: 12 Fecha de inicio: 30/01/2023 Fecha de terminación: 29/01/2024
Depto., Laboratorio, etc.: UAM-I, Depto. Química, Área de Biofisicoquímica
Depto., Laboratorio, etc.:  Av.San Rafael Atlixco 186, Leyes de Reforma 1ra. Secc, Iztapalapa 09340, CdMx  Domicilio de la institución:
Teléfono: Fax: E-mail @xanum.uam.mx
OBJETIVOS DEL PERÍODO SABÁΤΙCO Investigación en las líneas Termodinámica y Cinética de las Proteínas y Caracterización
Termodinámica de las interacciones Proteína-Ligando usando Simulación Macroscópica
THE PROPERTY OF THE PROPERTY O
METAS ALCANZADAS EN EL PERÍODO SABÁTICO  Memorias in extenso  Artículos de investigación en  Presentaciones en congresos
en libro de resúmenes* revista indexada*
Libros o capítulos de libros Grado Servicios de posgrado
Otros (especifique):
* Indicar en anexo si se trata de trabajo publicado, aceptado o sometido

TIPO DE ACTIVIDADES ACADÉMICAS D	
(Indique aquellas relacionadas con las actividad	des desarrolladas)
Investigación  Formación académica	Docencia Difusión  Formación profesional Entrenamiento técnico
Otros (especifique):	
RESUMEN DEL PLAN DE ACTIVIDADES (El llenado de esta sección no sustituye el infor	me detallado de actividades)
1Simulación macroscópica de la dimerización	de cistatina C Humana en un proceso de calentamiento de barrido térmico (DSC)
usando un mecanismo Lumry-Eyring medi	ante el uso del Software Mathematica 11.2.
<ol><li>2 Modelo ITC (Calorimetría de Titulación</li></ol>	Isotérmica) para la protonación de un sitio de una proteína y su interacción
con un ligando y su simulación macroscóp	ica usando Mathematica 11.2.
PARA USO DEL JEFE DE DEPARTAMEN	то
Después de haber evaluado el informe de	tallado de actividades del período sabático del interesado según los lineamientos
establecidos para tal efecto; informo al Consej	o Divisional que:
	Los objetivos SE cumplieron satisfactoriamente
	Los objetivos SE cumplieron parcialmente Los objetivos NO se cumplieron
	NO se cumplió el propósito del sabático
	`□
	11/03/2024
	Forba
Firma del Jete di	e Departamento Fecila
PARA USO DEL CONSEJO DIVISIONAL	
El Consejo Divisional, en su Sesión No.	del sobre el Período sabático de
interesado acordó que:	
	( Los objetivos SE cumplieron satisfactoriamente
	( Los objetivos SE cumplieron parcialmente
	Los objetivos NO se cumplieron
	NO se cumplió el propósito del sabático
	_
	Secretario del Consejo Divisional

<sup>\*</sup>Además de este formato-resumen, el interesado deberá entregar su Informe detallado de actividades junto con la documentación probatoria correspondiente.

### **PLAN DE TRABAJO**

A DESARROLLAR DURANTE EL PERIODO SABATICO DEL 30 DE ENERO DE 2023 AL 29 DE ENERO DE 2024 POR EL DR. JOSÉ ALFONSO ARROYO REYNA

#### **OBJETIVO**

Hacer investigación en la UAM-I en dos de las líneas de investigación que se cultivan en el Área de Biofisicoquímica; Estabilidad termodinámica y cinética de las proteínas y Caracterización termodinámica de las interacciones proteína-ligando usando simulación macroscópica.

#### **ANTECEDENTES**

A fines del año 2019 se publicó un artículo acerca de las interacciones entre las proteínas Cistatina Humana y peptidasas (David O. Tovar-Anaya, L. Irais Vera-Robles, M.Teresa Vieyra-Eusebio, Ponciano García-Gutiérrez, Francisco Reyes-Espinosa, Andrés Hernández-Arana, J. Alfonso Arroyo-Reyna, Rafael A. Zubillaga; The Protein Journal (2019), 38(5), 587-607). De esta investigación surgieron ideas para continuar nuevas investigaciones sobre este tema.

### ACTIVIDADES DE INVESTIGACIÓN

- Simulación macroscópica de la dimerización de cistatina C humana en un proceso de calentamiento de barrido térmico (DSC) usando un mecanismo Lumry-Eyring, mediante el uso del software Mathematica 11.2.
- Modelo de ITC (Calorimetría de Titulación isotérmica) para la protonación de un sitio de una proteína y su interacción con un ligando y su simulación macroscópica usando Mathematica 11.2.

#### METAS

Escribir al menos un artículo de investigación en una revista indexada.

Atentamente,

Dr. José Alfonso Arroyo Reyna

Profesor Titular C

Área de Biofisicoquímica

Depto. de Química, DCBI, UAM-Iztapalapa.

Jorge Garya Olquin



ÁREA DE BIOFISICOQUÍMICA DEPARTAMENTO DE QUÍMICA

11 de Marzo de 2024

# DR. ROMÁN LINARES ROMERO PRESIDENTE DEL CONSEJO DIVISIONAL DE CBI

Estimado Dr. Román Linares R.,

Por medio de la presente, me permito presentar el informe de las actividades realizadas durante el período sabático que disfruté.

El periodo sabático de 12 meses se inició el 30 de enero de 2023 y concluyó el 29 de enero de 2024, se desarrolló totalmente en la UAM-Iztapalapa. El paro estudiantil del año pasado me afectó notablemente porque tengo una licencia institucional de *Mathematica 11.2* y el software está instalado en una Desktop que tengo en mi cubículo. A continuación uso la numeración que aparece en el resumen del plan de actividades académicas desarrolladas del formato resumen del Informe de Período Sabático.

#### ACTIVIDADES DE INVESTIGACIÓN

1.- Simulación macroscópica de la dimerización de cistatina C Humana en un proceso de calentamiento de barrido térmico (DSC) usando un mecanismo Lumry-Eyring mediante el uso del Software *Mathematica* 11.2.

Para esta actividad, se propuso un nuevo mecanismo Lumry-Eyring, se planteó un sistema de ecuaciones diferenciales que se resolvieron por un conocido método numérico. Se elaboraron varios *Notebooks* de *Mathematica 11.2*, se escribió el artículo "Simulation of DSC Thermograms for the thermal dimerization of small proteins: Human Cystatin as an example ", el cual está siendo revisado por mis coautores y que se va a enviar a la revista *Computational and Mathematical Methods (Hindawi)*...En el Anexo 1 de este documento se presenta únicamente la primera hoja del trabajo.

2.- Modelo ITC (Calorimetría de Titulación Isotérmica) para la protonación de un sitio de una proteína y su interacción con un ligando y su simulación macroscópica usando *Mathematica* 11.2.

Se propuso un Modelo ITC de protonación de un sitio de una proteína con la interacción con un ligando, pero no se terminó de elaborar el modelo ITC (ver Anexo 2) ni la Simulación con algunos parámetros fisicoquímicos.

Atentamente,

Dr. José Alfonso Arroyo Reyna

Profesor Titular C