

Posgrado Institucional en
Ciencias Químicas y Bioquímicas
(PICQB)



Libro de Resúmenes

**Foro de
Ciencias Químicas y Bioquímicas 2025**

19 y 20 de junio



<https://www.picqb.uady.mx>
email: picqb@correo.uady.mx
Mérida, Yucatán
Junio 2025



UADY
UNIVERSIDAD
AUTÓNOMA
DE YUCATÁN



DIRECCIÓN GENERAL DE
DESARROLLO ACADÉMICO
POSGRADO INSTITUCIONAL EN
CIENCIAS QUÍMICAS Y BIOQUÍMICAS

FORO EN CIENCIAS QUÍMICAS Y BIOQUÍMICAS 2025

19 Y 20 DE JUNIO

LIBRO DE RESÚMENES

COMITÉ ORGANIZADOR

COORDINADOR

Dr. Gonzalo Joaquín Mena Rejón

MIEMBROS DEL COMITÉ ACADÉMICO DEL PICQB

Dra. Leydi Carrillo Cocom

Dr. David Muñoz Rodríguez

Dr. David Betancur Ancona

Dra. Mónica Sánchez González

Dr. Julio César Sacramento Rivero

Dr. Víctor Ermilo Arana Argáez

Dr. Julio César Lara Riegos

Dr. Miguel Arcadio Rosado Mendoza

Dr. Rolando David Cáceres Castillo

Dra. Fabiola Villa de la Torre

DISPONIBLE EN:

www.picqb.uady.mx/foro.php



Facultad de Ingeniería Química

Coordinación del Posgrado Institucional
en Ciencias Químicas y Bioquímicas
picqb@correo.uady.mx www.picqb.uady.mx

Facultad de Química





ÍNDICE

Evaluación del efecto citotóxico, toxicológico y antiartrítico del extracto metanólico de las hojas de <i>Phytolacca icosandra</i> en modelos in vitro e in vivo	1
Síntesis de nanopartículas de plata mediante el uso de extractos de <i>Sargassum spp.</i> y evaluación de sus actividades electroquímicas para su potencial uso en celdas de combustible.	3
Evaluación de nanopartículas de óxido de cadmio sintetizadas por el método sol-gel modificado con extractos vegetales para la fotorreducción de metales pesados en aguas contaminadas	5
Potencial antidiabético de extractos de distintos productos derivados de variedades de maíz (<i>Zea mays</i> L).	7
Determinación computacional de la ruta biogenética de las cheiloclinas A-I a través de métodos multiescala.	10
Evaluación del efecto de extractos etanólicos de alimentos vegetales tradicionales de Yucatán en la reducción de marcadores de estrés oxidativo y neuroinflamación	12
Determinación computacional de la ruta biogenética de las cheiloclinas A-I a través de métodos multiescala.	12
Estudio fitoquímico de las hojas de <i>Elaeodendron trichotomum</i>	15
Estudio de la inducción de la reprogramación celular mediante la sobreexpresión de reguladores epigenéticos en células troncales de la pulpa dental.	17
Síntesis y Evaluación del Acoplamiento Molecular de Híbridos Tiazólicos con Potencial Antiproliferativo	19
Sorción de compuestos apolares en una fase textil recubierta mediante sol-gel de polidimetilsiloxano-cianopropiltrietoxilano	21
Evaluación de nanoemulsiones de ceramidas y miel de <i>Melipona beecheii</i> para favorecer la humectación de la piel.	24
Evaluación in vitro de la actividad antitrombótica de péptidos de chíá generados por fermentación microbiana	26





Estudio de la hidrólisis del anillo lactónico de la ocraceólida A obtenida del extracto de <i>Elaeodendron trichotomum</i> .	28
Comparación del efecto del ácido valproico y el butirato de sodio en la diferenciación adipogénica de células troncales de ligamento periodontal	30
Estudio fitoquímico de hojas de <i>Maytenus phyllanthoides</i> Benth	33
Evaluación de la participación de las dioxigenasas de ADN TEN-ELEVEN TRANSLOCATION durante la inducción adipogénica de células troncales de la pulpa dental.	35
Desarrollo de un método de RMN para la cuantificación de ochraceólida A	38
Evaluación de la marca epigenética Histona 3 lisina 9 dimetilada en el proceso de diferenciación adipogénica de células troncales de ligamento periodontal.	40
Evaluación de la capacidad de remoción de tintes azoicos rojos por medio de nanopartículas de óxido de zinc dopadas con metales alcalinos	42
Aerogeles de celulosa bacteriana funcionalizados con grupos amino para la remoción de CO ₂ , colorantes y metales pesados: una aproximación desde cultivos de kombucha	44
Evaluación Antiparasitaria e Inmunomoduladora de la Mezcla de Benznidazol con Óxido de β -Cariofileno en un Modelo Murino de Infección Crónica con <i>Trypanosoma cruzi</i> .	46
Estandarización del ensayo de scratch para evaluar el potencial cicatrizante in vitro del extracto etanólico de <i>Bursera simaruba</i> en células del ligamento periodontal	48

Evaluación del efecto citotóxico, toxicológico y antiartrítico del extracto metanólico de las hojas de *Phytolacca icosandra* en modelos *in vitro* e *in vivo*

Pintor-Romero Valeria G.*, Arana-Argaez Victor E., Villa-de la Torre Fabiola E.

Laboratorio de Farmacología, Facultad de Química, UADY, Facultad de Química, UADY, calle 43 s/n x 96 Paseo de las Fuentes y 40 col. Inalámbrica. C.P. 97069. Mérida, Yucatán, México. *Correo: A23220551@alumnos.uady.mx, valeria21pintor@gmail.com | N° becario SECIHTI: 1325118

Palabras clave: Artritis Reumatoide, *Phytolacca icosandra*, antiinflamatorio, toxicológico.

Introducción: La Artritis Reumatoide (AR) es una enfermedad autoinmune que afecta al 1% de la población mundial¹. Aunque el tratamiento convencional controla los síntomas, es necesario explorar nuevas alternativas terapéuticas. *Phytolacca icosandra* se ha empleado en la medicina tradicional por sus propiedades analgésicas y antiartríticas². Por ello, en este trabajo se evaluó el efecto citotóxico, toxicológico y antiartrítico de su extracto metanólico.

Metodología: Se evaluó la citotoxicidad del extracto en macrófagos murinos, PBMCs y eritrocitos humanos, mediante ensayos de MTT y hemólisis (1-300 µg/mL). Se realizó un ensayo de toxicidad aguda en ratas Wistar con 50 y 300 mg/kg vía intragástrica, registrando signos de toxicidad³. Además, se administraron dosis de 50, 100 y 300 mg/kg a ratones BALB/c con AR inducida por colágeno tipo II. Se tomaron 3 muestras sanguíneas para cuantificar IL-6, IL-10, IL-1β, TNF-α, PGE₂ y LBT₄ mediante ELISA. Finalmente, se realizó el sacrificio y el análisis histológico de la articulación afectada mediante tinción H&E.

Análisis estadístico: Se usó ANOVA y pruebas *post hoc* para análisis estadístico con GraphPad Prism 7.0; p < 0.05 se consideró significativo.

Resultados: Se observó alta viabilidad en PBMCs y macrófagos (1–300 µg/mL), aunque presentó hemólisis dependiente de la concentración. No se presentaron signos de toxicidad *in vivo*. En ratones BALB/c con AR inducida, el extracto mostró un efecto antiartrítico dosis-dependiente, con reducción de IL-6, IL-1β, TNF-α, PGE₂ y LTB₄, aumento de IL-10, e inflamación y daño articular moderados, coincidentes con el análisis histológico.

Discusión: En el estudio, 300 mg/kg mostró mayor eficacia, 100 mg/kg mejoría parcial y 50 mg/kg efecto limitado, posiblemente por saponinas antiinflamatorias, presentes en otras especies del mismo género⁴, aunque se requieren más estudios.

Conclusiones: El extracto metanólico de *P. icosandra* mostró un efecto antiartrítico dosis-dependiente en ratones BALB/c, con seguridad adecuada en ensayos de toxicidad.

Referencias:

- (1) Instituto Nacional de las Personas Adultas Mayores. *Artritis Reumatoide*. <https://www.gob.mx/inapam/articulos/artritis-reumatoide> (accessed 2023-11-01).
- (2) Hitziger, M. *Mayan Phytotherapy in Guatemala: A Transdisciplinary Study for Ethnographic Documentation and Local Empowerment*, ETH Zurich, Alemania, 2016.
- (3) OECD/OCDE. *OECD GUIDELINE FOR TESTINT OF CHEMICALS-423: Acute Oral TOxicity-ACute Toxic Class Method*.
- (4) Sun, G.; Yang, W.; Zhang, Y.; Zhao, M. Esculentoside A Ameliorates Cecal Ligation and Puncture-Induced Acute Kidney Injury in Rats. *Exp Anim* **2017**, 66 (4), 303–312. <https://doi.org/10.1538/expanim.16-0102>.

Síntesis de nanopartículas de plata mediante el uso de extractos de *Sargassum* spp. y evaluación de sus actividades electroquímicas para su potencial uso en celdas de combustible.

Irving Geovanny Castro Pech¹, Dr. Alejandro Ávila Ortega¹, Dra. Mónica Arely Lucio García²

¹Laboratorio de química de materiales, Facultad de ingeniería química; ²Laboratorio de electroquímica, CICY.

a17123006@alumnos.uady.mx , castropechirvinggeovanny@gmail.com , No. de becario: 4041560

Palabras clave: Nanopartículas, *Sargassum*, Catalizador, Electroquímica.

Introducción: Las nanopartículas de plata (AgNP) se han destacado por sus propiedades electrónicas y catalíticas, lo que las convierte en materiales ideales para aplicaciones en celdas de combustible, especialmente en celdas de metanol directo (DMFC). Sin embargo, su síntesis convencional implica el uso de agentes químicos tóxicos que representan un riesgo para la salud y el medio ambiente. Como respuesta a esta problemática, la síntesis verde surge como una alternativa sostenible, utilizando extractos naturales como agentes reductores. En este contexto, el *Sargassum* spp., una macroalga marina invasiva común en las costas del Caribe representa una opción prometedora. Esta alga contiene compuestos fenólicos y flavonoides con capacidad reductora, capaces de sintetizar AgNP sin necesidad de productos químicos peligrosos.

Además del beneficio ambiental de reducir la acumulación de sargazo en las playas, su uso en síntesis de nanopartículas promueve un enfoque de economía circular al transformar un desecho en un material de alto valor agregado. Las AgNP obtenidas mediante extractos de sargazo han demostrado una actividad catalítica comparable o superior a las sintetizadas por métodos convencionales, lo que resalta su potencial para ser utilizadas como catalizadores en tecnologías energéticas limpias.

Metodología: En el desarrollo experimental, se recolectó sargazo de las costas de Playa del Carmen, el cual fue lavado, secado y molido. Posteriormente, se obtuvieron dos extractos mediante el método Soxhlet: uno acuoso y otro etanólico. La síntesis de las AgNP se realizó por reducción química utilizando nitrato de plata y los extractos, con tres concentraciones diferentes para cada uno, dando un total de seis tipos distintos de nanopartículas. Los extractos

fueron analizados para determinar su contenido de flavonoides y compuestos reductores, usando los métodos de cloruro de aluminio y Folin-Ciocalteu, respectivamente. Las nanopartículas sintetizadas fueron caracterizadas fisicoquímicamente mediante espectroscopía UV-Visible, FTIR, RAMAN, difracción de rayos X, microscopía electrónica de transmisión y caracterización electroquímica por voltamperometría cíclica, comparándolas con nanopartículas comerciales de platino.

Resultados: Actualmente, ya se sintetizaron los 6 tipos de nanopartículas, las cuales serán próximamente analizadas por UV-Vis y MET.

Referencias:

Abdel-Raouf, N., Al-Enazi, N. M., Ibraheem, I. B. M., Alharbi, R. M., & Alkhulaifi, M. M. (2019). Biosíntesis de nanopartículas de plata a partir del alga parda marina *Padina pavonia* y su caracterización. *Saudi Journal of Biological Sciences*, 26(6), 1207–1215. <https://doi.org/10.1016/j.sjbs.2018.01.007>

García Hernández, L., Ramírez Ortega, P., Arenas Islas, D., & Flores Guerrero, M. (2016). Caracterización electroquímica de nanopartículas de plata (AgNPS) obtenidas mediante química verde. *Tópicos de Investigación en Ciencias de la Tierra y Materiales*, 3, 247–254. <https://doi.org/https://doi.org/10.29057/aactm.v3i3.9806>

López-Miranda, J. L., Molina, G. A., Esparza, R., González-Reyna, M. A., Silva, R., & Estévez, M. (2021). Síntesis verde de nanopartículas de oro homogéneas utilizando *Sargassum* spp. y su actividad catalítica mejorada para colorantes orgánicos. *Toxics*, 9(11), 280. <https://doi.org/10.3390/toxics9110280>

Neumann, C. C. M., Laborda, E., Tschulik, K., Ward, K. R., & Compton, R. G. (2013). Performance of silver nanoparticles in the catalysis of the oxygen reduction reaction in neutral media: Efficiency limitation due to hydrogen peroxide escape. *Nano Research*, 6(7), 511–524. <https://doi.org/10.1007/s12274-013-0328-4>

Osman, A. I., Zhang, Y., Farghali, M., Rashwan, A. K., Eltaweil, A. S., Abd El-Monaem, E. M., Mohamed, I. M. A., Badr, M. M., Ihara, I., Rooney, D. W., & Yap, P. S. (2024). Synthesis of green nanoparticles for energy, biomedical, environmental, agricultural, and food applications: A review. En *Environmental Chemistry Letters* (Vol. 22, Número 2, pp. 841–887). Springer Science and Business Media Deutschland GmbH. <https://doi.org/10.1007/s10311-023-01682-3>

Ramírez Moreno, J. A. (2024). Síntesis verde de nanopartículas de Au y Ag soportadas en biocarbón derivado del *Sargassum* spp. para su aplicación en catálisis [Maestría]. Benemérita Universidad Autónoma de Puebla.

Evaluación de nanopartículas de óxido de cadmio sintetizadas por el método sol-gel modificado con extractos vegetales para la fotorreducción de metales pesados en aguas contaminadas

Perez Palma Marifer de los Milagros, Gonzalez Chan Irving Josué, Rosado Mendoza Miguel Arcadio.

Laboratorio de Físicoquímica, Facultad de Química, Universidad Autónoma de Yucatán, calle 43 s/n x 96 Paseo de las Fuentes y 40 Col. Inalámbrica. Mérida, Yucatán, 97069.

Correo institucional: a16000672@alumnos.uady.mx

Correo personal: mariferpp78@gmail.com

No. de becario SECIHCYT: 2056989.

Palabras clave: Óxido de cadmio, metales pesados, sol-gel, fotorreducción.

Introducción: La contaminación del agua por metales pesados es un problema crítico debido a los residuos derivados de actividades humanas. Una alternativa eficiente para la remoción de estos metales es el uso de procesos fotocatalíticos con nanopartículas de óxidos semiconductores, destacando el óxido de cadmio (CdO) por sus propiedades ópticas, que le confieren capacidad para la fotorreducción de metales en aguas residuales^{1,2,3}.

Metodología: Este estudio evaluó las propiedades fisicoquímicas de nanopartículas de CdO sintetizadas mediante el método sol-gel, utilizando extractos de hoja de papaya como agente reductor. La síntesis consistió en mezclar el extracto vegetal con una solución de cloruro de cadmio 0.2 M, ajustando el pH a 9 y 12 con hidróxido de sodio 1 M. Los precipitados obtenidos fueron procesados por centrifugado o filtrado al vacío y posteriormente calcinados a 600 °C. De manera adicional a un conjunto de muestras se les sometió a un lavado con agua destilada.

Resultados: El análisis térmico reveló un proceso endotérmico alrededor de 100 °C (por calorimetría diferencial), asociado a la pérdida de agua, y tres etapas de pérdida de masa: eliminación de humedad, degradación de materia orgánica y residuos relacionados con CdO (por análisis termogravimétrico). Los difractogramas de rayos X mostraron que las muestras calcinadas a pH 9 presentaron la fase monteponita de CdO, aunque con compuestos adicionales según el método de secado. A pH 12, la cristalinidad fue similar para las muestras centrifugada y filtrada, siendo la muestra lavada la más pura³.

Discusión: Los espectros de fotoelectrones de rayos X mostraron señales de cadmio a 405 eV (pH 12) y 406 eV (pH 9), compatibles con enlaces Cd–O. Para el oxígeno, se detectó una única señal alrededor de 531 eV, correspondiente al óxido. Por su parte, la espectroscopía UV-Vis indicó que la muestra a pH 12 tiene una banda prohibida de 1.6 eV y absorbe en todo el espectro visible, mientras que no se logró determinar la energía de banda prohibida para la muestra a pH 9^{3,4}.

Conclusión: Las propiedades fisicoquímicas del CdO obtenidas en este trabajo coinciden con lo reportado al utilizar el material en procesos de fotorreducción⁵.

Referencias

1. Tariq, W.; Nasir, A.; Arslan, C.; Rashid, H.; Sarmad, M.; Gillani, S. H. Photocatalytic Reduction of Highly Toxic Lead and Cadmium from Aqueous Solution. In *Emerging Techniques for Treatment of Toxic Metals from Wastewater*; Elsevier, 2023; pp 399–427. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-822880-7.00019-4>.
2. (17) Novack, A. M.; Hackbarth, F. V.; Marinho, B. A.; Dos Reis, G. S.; Valle, J. A. B.; Ulson De Souza, A. A.; Vilar, V. J. P.; Souza, S. M. A. G. Photocatalytic Reduction Of Cr (VI) Using Different Hybrid Materials: Titanium Nanosheets/Pozzolan And Kaolin/Polysiloxanes. In *Blucher Chemical Engineering Proceedings*; Editora Blucher: São Paulo, **2018**; pp 594–597. <https://doi.org/10.5151/cobeq2018-PT.0165>.
3. Mostafa, A. M.; Yousef, S. A.; Eisa, W. H.; Ewaida, M. A.; Al-Ashkar, E. A. Synthesis of Cadmium Oxide Nanoparticles by Pulsed Laser Ablation in Liquid Environment. *Optik (Stuttg)* **2017**, 144, 679–684. <https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2017.06.065>.
4. Singhwal, D.; Rana, P. S. Cadmium Oxide Nanoparticles Doped with Nickel and Silver: Photocatalytic Activity for Environmental Remediation. *Mater Chem Phys* **2024**, 314, 128895. <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2024.128895>.
5. Upadhyay, G. K.; Rajput, J. K.; Pathak, T. K.; Swart, H. C.; Purohit, L. P. Photoactive CdO:TiO₂ Nanocomposites for Dyes Degradation under Visible Light. *Mater Chem Phys* **2020**, 253, 123191. <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2020.123191>.

Potencial antidiabético de extractos de distintos productos derivados de variedades de maíz (*Zea mays* L).

Francisco Alejandro Huitz Segovia^{1*}, Maira Rubi Segura Campos¹, Mónica Noel Sánchez González¹

¹Facultad de Ingeniería Química, Universidad Autónoma de Yucatán, Periférico Norte Km. 33.5, Tablaje Catastral 13615, Colonia Chuburná de Hidalgo Inn, Mérida, Yucatán, México.

*Correspondencia: a23220553@alumnos.uady.mx; huitz.segovia@gmail.com

No. de becario SECIHTI: 1324421.

Palabras clave: Compuestos fenólicos, inhibición, maíz nixtamalizado, Maillard.

Introducción. En 2024, la diabetes mellitus tipo 2 representó entre 90-95 % de los casos diagnosticados.¹ A pesar de tratamientos y otras estrategias terapéuticas como dieta, ejercicio y educación, muchos pacientes no logran un control glucémico adecuado.² Por lo que es pertinente implementar estrategias complementarias en la alimentación. En México, el maíz procesado mediante la nixtamalización es ampliamente consumido. Este proceso alcalino produce el nixtamal, base de diversos alimentos.³ El maíz contiene compuestos con potencial para inhibir enzimas digestivas de la digestión de carbohidratos, como α -amilasa y α -glucosidasa.^{4,5}

Metodología. Se recolectaron granos, masa nixtamalizada y tortillas de maíz amarillo y blanco, y se extrajeron compuestos fenólicos (CF) libres y unidos covalentemente. Los extractos fueron analizados para determinar la concentración de fenoles y flavonoides totales, así como su capacidad inhibitoria *in vitro* sobre α -amilasa y α -glucosidasa.

Resultados. Los extractos de CF unidos covalentemente mostraron un mayor contenido de fenoles que los extractos libres. Los granos blancos (3.21 mg GAE/g) y amarillos (1.88 mg GAE/g) tuvieron la mayor concentración de CF, superando a los productos nixtamalizados. En cuanto a los flavonoides, los extractos derivados del maíz blanco presentaron mayor concentración que los derivados del maíz amarillo. Respecto a la actividad inhibitoria, los extractos libres de granos amarillos (41.83%) y tortilla amarilla (14.02%) presentaron mayor de inhibición de α -amilasa y α -glucosidasa. Los extractos de compuestos unidos covalentemente

de los granos amarillos y blancos mostraron la mayor inhibición de α -amilasa (47.51% y 47.43%) y α -glucosidasa (4.24% y 2.06%).

Discusión. Los efectos enzimáticos se correlacionaron significativamente con los CF unidos covalentemente; sin embargo, en las tortillas podrían generarse compuestos como productos de Maillard.^{6,7,8} El perfil de CF de las variedades de maíz resulta similar entre la fracción de CF libres y unidos. El ácido gálico, ferúlico y cinámico están presentes en ambas variedades, compuestos que se relacionan con la actividad inhibitoria enzimática.^{9,10}

Conclusiones. Los extractos de maíz amarillo y blanco son una fuente de compuestos bioactivos que inhiben α -amilasa y α -glucosidasa, con mayor efecto en granos y tortillas. No obstante, el procesamiento térmico, especialmente en tortillas, podría generar productos de Maillard que contribuyan a esta inhibición.

Referencias.

1. Organización Mundial de la Salud. (2023). *Diabetes*. <https://www.who.int/es/news-room/fact-sheets/detail/diabetes>
2. Fujiwara, Y., Eguchi, S., Murayama, H., Takahashi, Y., Toda, M., Imai, K., & Tsuda, K. (2019). Relationship between diet/exercise and pharmacotherapy to enhance the GLP-1 levels in type 2 diabetes. *Endocrinology, Diabetes & Metabolism*, 2(3), e00068.
3. Centro Internacional de Mejoramiento de Maíz y Trigo (CIMMYT). (2021). *¿Qué es la nixtamalización?* <https://www.cimmyt.org/es/noticias/que-es-la-nixtamalizacion/>
4. Salinas-Moreno, Y., García-Salinas, C., Ramírez-Díaz, J. L., & Alemán-de la Torre, I. (2017). Phenolic compounds in maize grains and its nixtamalized products. *Phenolic compounds-natural sources, importance and applications*, 8, 215-232.
5. Zhang, Q., de Mejia, E. G., Luna-Vital, D., Tao, T., Chandrasekaran, S., Chatham, L., & Kumar, D. (2019). Relationship of phenolic composition of selected purple maize (*Zea mays* L.) genotypes with their anti-inflammatory, anti-adipogenic and anti-diabetic potential. *Food Chemistry*, 289, 739-750.
6. Ademiluyi, A. O., Osalusi, S. E., Oyeleye, S. I., & Oboh, G. (2019). Antioxidant properties and inhibitory effects of selected tyrosine-derived Maillard reaction products on α -amylase, α -glucosidase and angiotensin-1 converting enzyme activities. *Biokemistri*, 31(2), 53-62.



7. Xiao, Q., Woo, M. W., Hu, J., Xiong, H., & Zhao, Q. (2021). The role of heating time on the characteristics, functional properties and antioxidant activity of enzyme-hydrolyzed rice proteins-glucose Maillard reaction products. *Food Bioscience*, 43, 101225.
8. Teodorowicz, G., Bastiaan-Net, S., Hoppenbrouwers, T., & Wichers, H. J. (2024). The Maillard reaction and food allergy: Impacts on sensitisation and on elicitation. In *Encyclopedia of Food Allergy*, 212-224. Elsevier.
9. Aleixandre, A., Gil, J. V., Sineiro, J., & Rosell, C. M. (2022). Understanding phenolic acids inhibition of α -amylase and α -glucosidase and influence of reaction conditions. *Food Chemistry*, 372, 131231.
10. Hu, C. M., Wang, W. J., Ye, Y. N., Kang, Y., Lin, J., Wu, P. P., & Zhang, K. (2021). Novel cinnamic acid magnolol derivatives as potent α -glucosidase and α -amylase inhibitors: Synthesis, *in vitro* and *in silico* studies. *Bioorganic chemistry*, 116, 105291.



Determinación computacional de la ruta biogenética de las cheiloclinas A-I a través de métodos multiescala

Briceño-Vargas Flor María¹, Quijano-Quñones Ramiro Felipe¹, Mirón-López Gumerindo²

¹Laboratorio de Química Teórica, Facultad de Química, Universidad Autónoma de Yucatán.

²Laboratorio de Resonancia Magnética Nuclear, Facultad de Química, Universidad Autónoma de Yucatán.

A15001548@alumnos.uady.mx, flormariamontserrat@gmail.com, Número de becario: 4012284

Palabras clave: productos naturales, Diels-Alder, cheiloclinas, ONIOM.

Introducción: Más de cuatrocientos productos naturales se asocian con un origen Diels-Alder debido a su naturaleza dimérica, a la coocurrencia con sus precursores y con sus isómeros.¹ Sin embargo, ciertos aductos pueden formarse mediante vías alternas en condiciones fisiológicas, sin necesidad de participación enzimática.^{2,3} Lo anterior hace necesario evaluar cada caso. La familia Celastraceae destaca por sus aductos Diels-Alder. Un caso relevante son las cheiloclinas A-I, un conjunto de nueve dímeros conformados por un triterpeno celastroloide y un sesquiterpeno de guayano, que resultan interesantes debido a que representan el único caso de aislamiento sistemático de regio y diastereómeros en un solo organismo.⁴

Metodología: Con el objetivo de obtener el perfil de la reacción para las cheiloclinas A-I, se emplearon métodos computacionales. Debido al tamaño de los dímeros, se recurrió al modelo multiescala ONIOM2(M06-2X/6-31G(d,p):xTB), añadiendo el efecto del medio acuoso mediante la aproximación ALPB de solvente implícito.

Resultados: Los resultados señalan dos vías de formación, siendo la primera una reacción concertada Hetero-Diels-Alder en las cheiloclinas C-F, G e I, mientras que las cheiloclinas A, B y H presentan un mecanismo en dos pasos, iniciando con una reacción HDA seguida de un rearreglo retro-Claisen. Las energías libres de activación para los procesos concertados oscilan entre las 30 y 36 kcal/mol, con excepción de las cheiloclinas E e I, cercanas a las 20 kcal/mol. En cambio, las barreras del paso limitante de las cheiloclinas A, B y H están entre las 17 y 21 kcal/mol.

Discusión: A comparación del proceso concertado, el tándem es preferido energéticamente. En los casos de las cheiloclinas A, B, H, E e I, las barreras del paso limitante son compatibles con la formación espontánea en condiciones normales ($\sim 15\text{-}20\text{ kcal/mol}$)⁵.

Conclusión: Los cálculos computacionales indican que los procesos de formación de las cheiloclinas A, B, H, E e I no requieren asistencia enzimática. Además, nuestros resultados sugieren que la selectividad está influenciada por fuerzas de dispersión y efectos estéricos entre los precursores

Referencias:

- (1) Oikawa, H.; Tokiwano, T. Enzymatic Catalysis of the Diels–Alder Reaction in the Biosynthesis of Natural Products. *Nat Prod Rep* **2004**, 21 (3), 321–352. <https://doi.org/10.1039/B305068H>.
- (2) Quijano-Quiñones, R.; Castro-Segura, C.; Mena-Rejón, G.; Quesadas-Rojas, M.; Cáceres-Castillo, D. Biosynthesis of Grandione: An Example of Tandem Hetero Diels–Alder/Retro-Claisen Rearrangement Reaction? *Molecules* **2018**, 23 (10), 2505. <https://doi.org/10.3390/molecules23102505>.
- (3) Quesadas-Rojas, M.; Mena-Rejon, G. J.; Castro-Segura, C. S.; Cáceres-Castillo, D. R.; Quijano-Quiñones, R. F. Theoretical Insight into the On-Water Catalytic Effect in the Biogenesis of Triterpene Dimers: From One-Step to Two-Step Hetero Diels–Alder Reactions. *New J. Chem.* **2021**, 45 (47), 22417–22423. <https://doi.org/10.1039/D1NJ04221A>.
- (4) Mesa-Siverio, D.; Chávez, H.; Estévez-Braun, A.; Ravelo, Á. G. Cheiloclinal A–I. First Examples of Octacyclic Sesquiterpene-Triterpene Hetero-Diels–Alder Adducts. *Tetrahedron* **2005**, 61 (2), 429–436. <https://doi.org/10.1016/j.tet.2004.10.074>.
- (5) Wang, S. C.; Tantillo, D. J. Theoretical Studies on Synthetic and Biosynthetic Oxidopyrylium–Alkene Cycloadditions: Pericyclic Pathways to Intricarene. *J. Org. Chem.* **2008**, 73 (4), 1516–1523. <https://doi.org/10.1021/jo7023762>.

Evaluación del efecto de extractos etanólicos de alimentos vegetales tradicionales de Yucatán en la reducción de marcadores de estrés oxidativo y neuroinflamación

Navarrete-Barrera Zabdiel Jesús¹, Segura-Campos Maira Rubi^{1,2}

¹Facultad de Ingeniería Química, Universidad Autónoma de Yucatán, Periférico Norte, Kilómetro 33.5. Mérida, Yucatán, CP 97302.

²Centro de Investigación Científica de Yucatán, A.C. Calle 43 No. 130 x 32 y 34, Chuburná de Hidalgo, Mérida, Yucatán, México, CP 97205

*Correspondencia:

A17115609@alumnos.uady.mx; navarretezabdiel@gmail.com

*Número de becario CONAHCYT: CVU 1318137

Palabras clave:

“Neuroinflamación”, “Antioxidantes” y “Compuestos bioactivos”

Introducción: Las enfermedades neurodegenerativas (EN) son una causa creciente de mortalidad global, asociadas con procesos celulares como el estrés oxidativo (EO) e inflamación crónica^{1,2}. Ante las limitaciones de los tratamientos actuales, los alimentos funcionales con compuestos bioactivos antioxidantes y antiinflamatorios representan una estrategia complementaria de interés^{3,4}. En este contexto, los alimentos tradicionales de la milpa yucateca ofrecen una fuente de metabolitos con potencial terapéutico^{5,6}.

Metodología: Se recolectaron 14 especies vegetales comestibles de milpas en Tixméhuac, Yucatán (xpelón, achiote, maíz, moringa, calabaza, chile, pepino kat, pepino blanco, ciruela, saramuyo, zapote negro, zapote, taro y jícama), de las cuales se obtuvieron extractos etanólicos. Se determinaron los contenidos de fenoles y flavonoides totales y la actividad antioxidante mediante DPPH, ABTS y PFRAP. La citotoxicidad se evaluó en líneas celulares neuronales (CHP-212) y de microglía humana (HMC3) mediante MTT, bajo EO inducido por H₂O₂ o TBHP, y neuroinflamación inducida por lipopolisacáridos, midiendo TNF- α , IL-6 y óxido nítrico (NO). Se aplicó ANOVA y prueba post hoc de Tukey ($p < 0.05$) con Statgraphics.

Resultados: El extracto de xpelón presentó la mayor capacidad antioxidante en los ensayos DPPH ($67.05 \pm 3.13\%$), ABTS ($85.89 \pm 1.79\%$) y PFRAP ($64.07 \pm 1.28\%$). En modelos celulares,

protegió a las neuronas del H_2O_2 ($81.33 \pm 5.51\%$) y mostró efecto citoprotector en microglía con TBHP ($73.43 \pm 2.89\%$). Además, redujo significativamente los niveles de TNF- α ($24.66 \pm 3.30\%$), IL-6 ($35.83 \pm 2.32\%$) y NO ($40.33 \pm 1.21\%$). El extracto de achiote también mostró capacidad antioxidante elevada en DPPH ($58.16 \pm 3.83\%$), ABTS ($59.36 \pm 2.36\%$) y PFRAP ($58.17 \pm 1.29\%$). En microglía, ejerció efecto citoprotector ($64.34 \pm 2.45\%$) y redujo TNF- α ($18.82 \pm 2.00\%$), IL-6 ($27.59 \pm 2.79\%$) y NO ($33.51 \pm 3.55\%$).

Discusión: Los efectos observados podrían explicarse por la presencia de flavonoides y otros polifenoles con capacidad para modular rutas redox e inflamatorias, como Nrf2 y NF- κB ^{7,8}. En xpelón, su mayor capacidad reductora se relaciona con su concentración de fenoles^{9,10}. En el caso del achiote, la presencia de bixina y norbixina también podría contribuir significativamente a sus efectos antiinflamatorios^{8,11}.

Conclusiones: Xpelón y achiote se perfilan como candidatos prometedores para el desarrollo de alimentos funcionales o nutraceuticos dirigidos a la prevención o apoyo terapéutico en EN. Los hallazgos los posicionan como fuentes vegetales con propiedades funcionales relevantes en el contexto de la neurodegeneración.

REFERENCIAS:

- (1) OMS. *HUMAN DEVELOPMENT REPORT 2021/2022*; 2022.
- (2) Bianchi, V. E.; Herrera, P. F.; Laura, R. Effect of Nutrition on Neurodegenerative Diseases. A Systematic Review. *Nutr Neurosci* **2021**, 24 (10), 810–834. <https://doi.org/10.1080/1028415X.2019.1681088>.
- (3) Cuffaro, D.; Digiacomo, M.; Macchia, M. Dietary Bioactive Compounds: Implications for Oxidative Stress and Inflammation. *Nutrients* 2023, Vol. 15, Page 4966 **2023**, 15 (23), 4966. <https://doi.org/10.3390/NU15234966>.
- (4) John, T.; Samuel, B.; Abolaji, O.; Folashade, O.; Oyetooke, A.; Oluwatosin, F.; John, T.; Samuel, B.; Abolaji, O.; Folashade, O.; Oyetooke, A.; Oluwatosin, F. Functional Foods and Bioactive Compounds: Roles in the Prevention, Treatment and Management of Neurodegenerative Diseases. *GSC Biol Pharm Sci* **2020**, 11 (2), 297–313. <https://doi.org/10.30574/GSCBPS.2020.11.2.0143>.
- (5) Méndez-Flores, O. G.; Ochoa-Díaz López, H.; Castro-Quezada, I.; Olivo-Vidal, Z. E.; García-Miranda, R.; Rodríguez-Robles, U.; Irecta-Nájera, C. A.; López-Ramírez, G.; Sánchez-Chino, X. M. The Milpa as A Supplier of Bioactive Compounds: A Review. *Food Rev Int* **2023**, 39 (3), 1359–1376. <https://doi.org/10.1080/87559129.2021.1934001>.



- (6) Sánchez-Velázquez, O. A.; Luna-Vital, D. A.; Morales-Hernandez, N.; Contreras, J.; Villaseñor-Tapia, E. C.; Fragoso-Medina, J. A.; Mojica, L. Nutritional, Bioactive Components and Health Properties of the Milpa Triad System Seeds (Corn, Common Bean and Pumpkin). *Front Nutr* **2023**, *10*, 1169675. <https://doi.org/10.3389/FNUT.2023.1169675/BIBTEX>.
- (7) Yu, Y.; Wu, D. M.; Li, J.; Deng, S. H.; Liu, T.; Zhang, T.; He, M.; Zhao, Y. Y.; Xu, Y. Bixin Attenuates Experimental Autoimmune Encephalomyelitis by Suppressing TXNIP/NLRP3 Inflammasome Activity and Activating NRF2 Signaling. *Front Immunol* **2020**, *11*, 593368. <https://doi.org/10.3389/FIMMU.2020.593368/BIBTEX>.
- (8) Yu, Y.; Wu, D. M.; Li, J.; Deng, S. H.; Liu, T.; Zhang, T.; He, M.; Zhao, Y. Y.; Xu, Y. Bixin Attenuates Experimental Autoimmune Encephalomyelitis by Suppressing TXNIP/NLRP3 Inflammasome Activity and Activating NRF2 Signaling. *Front Immunol* **2020**, *11*, 593368. <https://doi.org/10.3389/FIMMU.2020.593368/BIBTEX>.
- (9) Abatchoua, A.; Ibram, M. M.; Njintang, N. Y.; Youmbi, E.; Tchiagam Noubissié, J.-B.; Njintang, N. Y.; Abatchoua, M. A.; Nguimbou, R. M.; Bell, J. M. Inheritance of Phenolic Contents and Antioxidant Capacity of Dehulled Seeds in Cowpea (*Vigna Unguiculata* L. Walp.). *IJAAR* **2012**, *2* (3), 7–18.
- (10) Siddhuraju, P.; Becker, K. The Antioxidant and Free Radical Scavenging Activities of Processed Cowpea (*Vigna Unguiculata* (L.) Walp.) Seed Extracts. *Food Chem* **2007**, *101* (1), 10–19. <https://doi.org/10.1016/J.FOODCHEM.2006.01.004>.
- (11) de Oliveira Júnior, R. G.; Bonnet, A.; Braconnier, E.; Groult, H.; Prunier, G.; Beaugeard, L.; Grougnet, R.; da Silva Almeida, J. R. G.; Ferraz, C. A. A.; Picot, L. Bixin, an Apocarotenoid Isolated from *Bixa Orellana* L., Sensitizes Human Melanoma Cells to Dacarbazine-Induced Apoptosis through ROS-Mediated Cytotoxicity. *Food and Chemical Toxicology* **2019**, *125*, 549–561. <https://doi.org/10.1016/j.fct.2019.02.013>.

Estudio fitoquímico de las hojas de *Elaeodendron trichotomum*

Aké Pech Michael Deniss, Mena Rejón Gonzalo, Mirón López Gumersindo.

Laboratorio de Química Farmacéutica, Facultad de Química, Universidad autónoma de Yucatán.

A18019503@alumnos.uady.mx | akepechmichael@gmail.com | No. de becario SECIHCYT: 1310681

Palabras clave: Fitoquímico, *trichotomum*, hojas, Celastraceae.

15

Introducción: La familia Celastraceae está ampliamente distribuida y destaca por su uso en medicina tradicional. Las especies de esta familia producen compuestos con actividades farmacológicas diversas debido a su heterogeneidad estructural. Con este trabajo se pretende identificar metabolitos en las hojas de *Elaeodendron trichotomum* para ampliar la información sobre su composición química.¹⁻⁵

Metodología: Las hojas secas y molidas se extrajeron por maceración empleando hexano (Hx), diclorometano (DCM) y acetato de etilo (AcOEt). El extracto de diclorometano fue fraccionado por cromatografía en columna (CC) con gel de sílice (SG) y proporciones de Hx-AcOEt en polaridad ascendente. Las fracciones se agruparon por similitud en cromatografía en capa delgada, obteniendo 18 fracciones primarias. De las cuales, la 10^a, 12^a y 14^a se subfraccionaron con Sephadex LH-20 y Hx-CHCl₃-Metanol 2:1:1. Las subfracciones se sometieron a separación por CC con SG y posteriormente a cromatografía en capa delgada preparativa hasta el aislamiento de cinco compuestos, identificados por resonancia magnética nuclear.

Resultados: A partir de 1300 g de material vegetal seco, se obtuvieron 44.5 g de extracto de Hx, 33.8 g de DCM y 13.4 g de AcOEt. En la fracción DCM-NGF (11.9 mg), se identificó la loliólida. Mientras que, a partir de DCM-LCB se obtuvieron 2.2 mg de 3-hidroxi- α -ionona. Por otra parte, tres fracciones (DCM-LBB, DCM-JCH y DCM-JBB) demostraron poseer una mezcla de las amirinas α y β con un hidroxilo en posición 24, con un total de 13.6 mg. Además, en DCM-LBC se hallaron 2.0 mg de un compuesto nuevo identificado como 3 β ,24-dihidroxi-13(28)-epoxi-urs-11-eno.

Discusión: De los cinco compuestos, los dos primeros son productos de degradación de carotenos, uno con una lactona y el otro con una cetona; y los tres últimos triterpenoides pentacíclicos, uno con un epóxido. Todos con hidroxilos e insaturaciones en diferentes

posiciones. Este es el primer reporte de ellos en *E. trichotomum* y el primero en Celastraceae de los últimos cuatro.

Conclusiones: Con la determinación de la identidad de estos productos naturales se evidencia la capacidad de *E. trichotomum* para biosintetizar compuestos con diferentes funcionalizaciones que aún no se reportan en la familia Celastraceae, así como compuestos que no se han identificado en ninguna otra especie.

Referencias:

1. Camargo, K.C.; de Aguilar, M.G.; Moraes, A.R.A.; de Castro, R.G.; Szczerbowski, D.; Miguel, E.L.M.; Oliveira, L.R.; Sousa, G.F.; Vidal, D.M.; Duarte, L.P. Pentacyclic Triterpenoids Isolated from Celastraceae: A Focus in the ¹³C-NMR Data. *Molecules* [En línea] **2022**, 27, 959.
2. Moujir, L.; López, M.R.; Reyes, C.P.; Jiménez, I.A.; Bazzocchi, I.L. Structural Requirements for Antimicrobial Activity of Phenolic Nor-Triterpenes from Celastraceae Species. *Appl. Sci.* [En línea] **2019**, 9, 2957.
3. Bazzocchi, I.L.; Núñez, M.J.; Reyes, C.P. Bioactive diterpenoids from Celastraceae species. *Phytochem. Rev.* [En línea] **2017**, 16, 861–881.
4. Núñez, M.J.; Jiménez, I.A.; Mendoza, C.R.; Chavez-Sifontes, M.; Martínez, M.L.; Ichiishi, E.; Tokuda, R.; Tokuda, H.; Bazzocchi, I. L. Dihydro- β -agarofuran sesquiterpenes from Celastraceae species as anti-tumour-promoting agents: Structure-activity relationship. *Eur. J. Med. Chem.* [En línea] **2016**, 111, 95-102.
5. Ghante, M.H.; Jamkhande, P.G. Role of Pentacyclic Triterpenoids in Chemoprevention and Anticancer Treatment: An Overview on Targets and Underling Mechanisms. *Journal of Pharmacopuncture* [En línea] **2019**, 22, 55-67.

Estudio de la inducción de la reprogramación celular mediante la sobreexpresión de reguladores epigenéticos en células troncales de la pulpa dental

Ulíbarri-Viniegra Valeria^{1*}, Flores-Ponce Xóchitl², Velasco-Velázquez Iván², Carrillo-Cocom Leydi M.¹, Nic-Can Geovanny I.^{3,4}

¹Facultad de Ingeniería Química, Universidad Autónoma de Yucatán, Periférico Norte, Kilómetro 33.5. Mérida, Yucatán, CP 97302.

²Departamento de Neurodesarrollo y Fisiología, Instituto de Fisiología Celular, Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad de México, CP 04510.

³Laboratorio de Células Troncales de Origen Bucal, Facultad de Odontología, Universidad Autónoma de Yucatán, Calle 61A x 90 y 92. Mérida, Yucatán, CP 97000.

⁴CONACYT-Facultad de Ingeniería Química, Universidad Autónoma de Yucatán. Periférico Norte Kilómetro 33.5. Mérida, Yucatán, CP 97302.

*Correspondencia:

A14001700@alumnos.uady.mx; valeriaulibbarri@hotmail.com.

*Número de becario SECIHTI: 4010490.

Palabras clave: Células troncales de pulpa dental, Epigenética, Reprogramación celular.

Introducción: Las células troncales derivadas de la pulpa dental (CTPD) son candidatas ideales para la generación de células pluripotenciales inducidas (iPSC) por su accesibilidad y características desdiferenciadas¹. No obstante, la reprogramación de las CTPD es ineficiente, principalmente por barreras epigenéticas². Por tanto, el objetivo de este estudio fue evaluar el efecto de la sobreexpresión de moduladores epigenéticos (*KDM4A* y *TET1*) y factores transcripcionales (*OCT4* y *SOX2*) sobre la reprogramación celular de CTPD.

Metodología: Las CTPD se sometieron a sobreexpresión de *KDM4A*, *TET1*, *OCT4* y *SOX2*, previo a la reprogramación celular con medios embriogénicos (hESC y TeSR1) en presencia de moléculas inductoras, y se compararon con métodos no integrativos como Virus Sendai y plásmidos episomales. Se monitorearon los cambios morfológicos y la presencia de marcadores pluripotenciales mediante inmunofluorescencia. Además, se evaluó la expresión génica en diversos puntos de tiempo mediante qPCR. Los resultados de la expresión fueron utilizados

para determinar diferencias significativas entre los tratamientos mediante la prueba t Student en GraphPad ($p < 0.05$).

Resultados: Aunque la sobreexpresión aumentó los niveles de genes pluripotenciales durante el inicio de reprogramación, este perfil no se sostuvo. Además, el pretratamiento de las CTPD transfectadas en hESC con moléculas inductoras formó adipocitos y los tratamientos de coexpresión en TeSR1 no alcanzaron la pluripotencia. En cambio, la transducción con Virus Sendai produjo una reprogramación rápida pero inestable, mientras que el uso de plásmidos episomales (*LIN28*, *L-MYC* y *shp53*), permitió la generación de colonias y el mantenimiento de marcadores clave.

Discusión: Los hallazgos resaltan la complejidad de reprogramar CTPD, probablemente por retención de memoria epigenética que bloquea la transición mesenquimal-epitelial. Las CTPD transducidas, a pesar de presentar los marcadores, fueron inestables y revertidas. Sin embargo, la incorporación de factores determinantes como *LIN28*, *L-MYC* y la inhibición de *p53* conllevó a la activación de *NANOG* y a la pluripotencia.

Conclusiones: La modificación del paisaje epigenético puede activar o reprimir la actividad transcripcional, modificando la decisión celular. Así, la combinación de efectores epigenéticos puede reactivar diversos programas como el adipogénico, pero la optimización de vectores de entrega y factores transcripcionales clave pueden derivar en la formación de iPSC estables en CTPD.

Referencias:

Mercado-Rubio, M. D., Pérez-Argueta, E., Zepeda-Pedreguera, A., Aguilar-Ayala, F. J., Peñaloza-Cuevas, R., Kú-González, A., Rojas-Herrera, R. A., Rodas-Junco, B. A., y Nic-Can, G. I. (2021). Similar Features, Different Behaviors: A Comparative In Vitro Study of the Adipogenic Potential of Stem Cells from Human Follicle, Dental Pulp, and Periodontal Ligament. *Journal of Personalized Medicine* 2021, Vol. 11, Page 738, 11(8), 738. <https://doi.org/10.3390/JPM11080738>

Soda, M., Saitoh, I., Murakami, T., Inada, E., Iwase, Y., Noguchi, H., Shibasaki, S., Kurosawa, M., Sawami, T., Terunuma, M., Kubota, N., Terao, Y., Ohshima, H., Hayasaki, H., y Sato, M. (2019). Repeated human deciduous tooth-derived dental pulp cell reprogramming factor transfection yields multipotent intermediate cells with enhanced iPS cell formation capability. *Scientific Reports*, 9(1), 1–13. <https://doi.org/10.1038/s41598-018-37291-2>

Síntesis y Evaluación del Acoplamiento Molecular de Híbridos Tiazólicos con Potencial Antiproliferativo

Daniel Enrique Ordoñez Montero, David Cáceres Castillo, Ramiro F. Quijano Quiñones.

Laboratorio de Química Farmacéutica, Facultad de Química, Universidad Autónoma de Yucatán.

A15004284@alumnos.uady.mx, danielordoez@hotmail.com. No. becario SECIHTI: 4012350.

Palabras clave: Cáncer, híbridos, acoplamiento molecular, síntesis racional.

19

Introducción: El cáncer de mama posee una de las mayores incidencias en el mundo.¹ Dentro de las estrategias farmacológicas anticancerígenas destaca el estudio de moléculas pequeñas frente a objetivos proteicos como el receptor estrogénico alfa ($ER\alpha$), receptor de crecimiento epidérmico (EGFR), blanco de la rapamicina en células de mamífero (mTOR) y tubulina (TUB), particularmente aquellas con estructuras privilegiadas como el tiazol, benzofurano, cumarina y chalcona.^{2,3} Este estudio explora el potencial antiproliferativo de híbridos tiazolil-benzofurano, tiazolil-cumarina y tiazolil-chalcona frente a los receptores antes mencionados mediante acoplamiento molecular para realizar una síntesis racional.

Metodología: Los ligandos fueron optimizados usando el nivel de cálculo B3LYP/6-31G(d) con el código ORCA. Los receptores fueron obtenidos del *Protein Data Bank* mediante las entradas 3ERT, 1M17, 4JSX y 4O2B. El tratamiento de ligandos y receptores se realizó mediante *Chimera* y *AutoDock Tools*. El cálculo empleó 5,000,000 de evaluaciones y 100 repeticiones. La validación consistió en un re-acoplamiento molecular. La síntesis involucró la transformación de la posición 5 de un derivado 2-aril-4-metil-5-acetiltiazol a un salicilaldehído, el cual, en presencia de una mezcla de acetona, carbonato de potasio y α -bromoacetofenona a temperatura ambiente durante 48 horas, logró la formación de la molécula objetivo.⁴

Resultados: La desviación cuadrática media (RMSD) de los ligandos nativos de $ER\alpha$, EGFR, mTOR y TUB fue de 1.381, 1.782, 0.687 y 1.019 Å con puntuaciones de -11.43, -7.4, -8.77 y -9.92 kcal/mol respectivamente. Los híbridos estudiados presentaron intervalos de puntuación entre -7.35 y -10.2, -7.43 y -11.31, -5.04 y -8.46 y -7.89 y -12.72 kcal/mol frente a $ER\alpha$, EGFR, mTOR y TUB respectivamente. El experimento de RMN-¹H mostró un doblete a δ 7.69 ($J=0.95$ Hz) y un doble de dobles no resuelto a δ 7.75.

Discusión: La metodología fue validada obteniendo un RMSD <2 Å frente a cada receptor.⁵ Los híbridos tiazolil-cumarina y tiazolil-benzofurano obtuvieron las menores puntuaciones frente a los receptores estudiados. Específicamente la 1-(6-(2-(4-clorofenil)-4-metiltiazol-5-il)-4-fenilbenzofuran-2-il)etanona (TzBf2) presentó el mejor perfil de interacción, especialmente frente a EGFR y TUB. La información espectroscópica confirmó la síntesis de TzBf2.

Conclusión: El híbrido TzBf2 fue sintetizado al demostrar el mejor potencial antiproliferativo, confirmando la factibilidad de la estrategia sintética empleada.

Referencias:

1. Bray, F.; Laversanne, M.; Sung, H.; Ferlay, J.; Siegel, R. L.; Soerjomataram, I.; Jemal, A. Global Cancer Statistics 2022: GLOBOCAN Estimates of Incidence and Mortality Worldwide for 36 Cancers in 185 Countries. *CA Cancer J. Clin.* **2024**, *74*, 229–263. <https://doi.org/10.3322/caac.21834>
2. Mayank; Jaitak, V. Drug Target Strategies in Breast Cancer Treatment: Recent Developments. *Anticancer Agents Med. Chem.* **2014**, *14*, 1414–1427. <https://doi.org/10.2174/1871520614666140407114853>
3. *Privileged Scaffolds in Drug Discovery*, 1a ed.; Yu, B., Li, N., Fu, C., Eds.; Academic Press, 2023. <https://doi.org/10.1016/C2022-0-00047-7>
4. López Castillejos, M. Estudio sintético en la obtención de un híbrido tiazol-cumarina. Tesis de maestría, Universidad Autónoma de Yucatán, Mérida, Yucatán, noviembre 2023.
5. Che, X.; Liu, Q.; Zhang, L. An Accurate and Universal Protein-Small Molecule Batch Docking Solution Using Autodock Vina. *Results Eng.* **2023**, *19*, 101335. <https://doi.org/10.1016/j.rineng.2023.101335>

Sorción de compuestos apolares en una fase textil recubierta mediante sol-gel de polidimetilsiloxano-cianopropiltrietoxilano

López Chan Diana Lin-yu, Muñoz Rodríguez David, Pérez Padilla Yamile

Facultad de Ingeniería Química, Universidad Autónoma de Yucatán, Periférico Norte Kilómetro 33.5. Tablaje Catastral 13615. Chuburná de Hidalgo Inn. Mérida, Yucatán, C.P. 97302.

A14003902@alumnos.uady.mx , linga98@gmail.com, No. Becario: 1325110

Palabras clave: FPSE; Ivermectina; Extracción; pretratamiento analítico

Introducción: La preparación de muestras es una etapa crítica en el análisis químico ya que las interferencias de matriz pueden afectar la precisión y sensibilidad de los instrumentos analíticos.¹ En respuesta a ello, se han desarrollado técnicas de extracción basadas en los principios de la química verde para mejorar la eficiencia y selectividad de la extracción.^{1,2} Entre estas técnicas, destaca la extracción por sorción en fase textil (FPSE), desarrollada en 2014 por Kabir y Furton³ usando fibras textiles recubiertas con materiales híbridos como medios adsorbentes. A diferencia de otras técnicas, la FPSE permite una alta eficiencia de extracción utilizando volúmenes mínimos de muestra y solvente, y ofrece mayor versatilidad en cuanto a matrices y analitos.^{1,2,4}

Metodología: En este trabajo se desarrolló un medio FPSE a partir de fragmentos (sustratos) de polipropileno tipo *meltblown* obtenidos de cubrebocas KN95, recubiertos por *dip coating* con un polímero híbrido de polidimetilsiloxano y cianopropiltrietoxisilano (PDMS-CIANO). Los sustratos se sometieron a una limpieza química y luego se caracterizaron por FTIR, SEM, TGA, ángulo de contacto, colorimetría y pruebas de resistencia química frente a solventes y soluciones acuosas con diferentes valores de pH.

Resultados y discusión: Los resultados de FTIR y SEM, confirmaron la incorporación efectiva del recubrimiento híbrido y una mejora notable en la hidrofiliidad del soporte evidenciada por una disminución en el valor de ángulo de contacto. Además, los medios FPSE desarrollados demostraron una buena estabilidad térmica (hasta 230 °C) y resistencia química.

Finalmente, se evaluó la aplicación de los medios FPSE en la extracción de ivermectina. Esta es una lactona macrocíclica apolar empleada como antiparasitario,⁵ que ha sido detectada en leche y tejido animal.⁶⁻⁸

Conclusión: Las pruebas de caracterización y la evaluación en la extracción de ivermectina permitieron validar el cumplimiento los objetivos planteados, al determinarse las propiedades estructurales, térmicas y químicas del medio FPSE desarrollado, así como su desempeño exitoso en la técnica de extracción por sorción en fase textil en diferentes tipos de muestras, demostrando la capacidad de extracción que el medio desarrollado posee. Esto confirma su utilidad como herramienta práctica, sostenible y funcional en aplicaciones analíticas reales.

Referencias:

- (1) Locatelli, M.; Rosato, E.; D'Ovidio, C.; Bonelli, M.; Ulusoy, H.; Kabir, A.; Ali, I.; Savini, F.; de Grazia, U.; Samanidou, V.; Tartaglia, A. Modern Green Extraction Techniques. In *Sustainable Approaches in Pharmaceutical Sciences*; Wiley, 2023; pp 35–63. <https://doi.org/10.1002/9781119889878.ch3>.
- (2) Sargazi, M.; Hossein Hashemi, S.; Kaykhaili, M. Modern Sample Preparation Techniques: A Brief Introduction. In *Sample Preparation Techniques for Chemical Analysis*; IntechOpen, 2021. <https://doi.org/10.5772/intechopen.100715>.
- (3) Kabir, A.; Furton, K. G. FABRIC PHASE SORPTIVE EXTRACTORS (FPSE), 2014.
- (4) Kubica, P.; Kalogiouri, N. P.; Kabir, A.; Furton, K. G.; Samanidou, V. F. Optimization of a Fabric Phase Sorptive Extraction Protocol for the Isolation of Six Bisphenols from Juice Pouches to Be Analysed by High Performance Liquid Chromatography Coupled with Diode Array Detector. *J Chromatogr A* **2023**, 1708, 464366. <https://doi.org/10.1016/j.chroma.2023.464366>.
- (5) Khemrattrakool, P.; Hongsuwong, T.; Tiphara, P.; Kullasakboonsri, R.; Phanphoo Wong, T.; Sriwichai, P.; Hanboonkunupakarn, B.; Jittamala, P.; Tarning, J.; Kobylinski, K. C. Impact of Ivermectin Components on Anopheles Dirus and Anopheles Minimus Mosquito Survival. *Parasit Vectors* **2024**, 17 (1), 224. <https://doi.org/10.1186/s13071-024-06294-6>.
- (6) Zakaria, A.; Mohamed, R.; H, R.; Omarak, R. Occurrence of Ivermectin Residues in Egyptian Retail Market Milk and the Effect of Some Processing Treatments on Reduction of Its Concentration. *Alex J Vet Sci* **2019**, 63 (2), 1. <https://doi.org/10.5455/ajvs.70210>.



- (7) Paucar-Quishpe, V.; Cepeda-Bastidas, D.; Rodríguez-Hidalgo, R.; Pérez-Otáñez, X.; Perez, C.; Enríquez, S.; Guzman, E.; Ulcuango, F.; Grijalva, J.; Vanwambeke, S. O.; Ron-Garrido, L.; Saegerman, C. Evaluating the Human Risks of Consumption of Foods of Bovine Origin with Ivermectin Residues in Ecuador. *Foods* **2024**, *13* (21), 3470. <https://doi.org/10.3390/foods13213470>.
- (8) Soares, V. M.; Pereira, J. G.; Barreto, F.; Jank, L.; Rau, R. B.; Dias Ribeiro, C. B.; dos Santos Castilhos, T.; Tomaszewski, C. A.; Hillesheim, D. R.; Mondadori, R. G.; Tadielo, L. E.; dos Santos, E. A. R.; da Cruz Encide Sampaio, A. N.; Cerqueira-Cézar, C. K.; Duval, E. H.; da Silva, W. P. Residues of Veterinary Drugs in Animal Products Commercialized in the Border Region of Brazil, Argentina, and Uruguay. *J Food Prot* **2022**, *85* (6), 980–986. <https://doi.org/10.4315/JFP-21-415>.



Evaluación de nanoemulsiones de ceramidas y miel de *Melipona beecheii* para favorecer la humectación de la piel.

Autores: María Fernanda Aguirre Martínez^{1*}, Zaida Urbán Morlán², David Betancur Ancona¹

¹FIQ, UADY, Yucatán, México; ²FQ, UADY, Yucatán, México.

*a17115625@alumnos.uady.mx; fer_aguirre@hotmail.es; No. 4041663

Palabras clave: nanoemulsión, piel, miel, ceramidas

24

Introducción: El aumento de la conciencia sobre el cuidado de la piel ha impulsado la búsqueda de formulaciones innovadoras y eficaces que atiendan afecciones dermatológicas frecuentes como la xerosis o piel seca. Esta condición se caracteriza por una pérdida excesiva de humedad en la epidermis, comprometiendo la función de barrera cutánea y provocando síntomas como descamación, tirantez e irritación. En este contexto, las ceramidas han demostrado ser componentes clave para restaurar la barrera lipídica de la piel, mientras que la miel de *Melipona beecheii* se ha reconocido por sus propiedades antioxidantes, antimicrobianas y regenerativas, derivadas de su contenido en azúcares, compuestos fenólicos, vitaminas y minerales. Este estudio propuso el desarrollo de una nanoemulsión combinando ambos ingredientes, con el fin de aprovechar sus efectos humectantes y reparadores. Las nanoemulsiones fueron seleccionadas como vehículo cosmético por su capacidad para mejorar la penetración de activos, incrementar la estabilidad de los componentes y permitir una liberación controlada.

Metodología: Se empleará un diseño experimental que evaluará distintas concentraciones de ambos ingredientes, seguido de pruebas fisicoquímicas, organolépticas y de estabilidad.

Resultados: Se formularon 27 nanoemulsiones con variaciones en las concentraciones de ceramida III (0.5%, 5%, 20%) y miel de *Melipona beecheii* (3%, 5%, 10%). Estas formulaciones fueron evaluadas con base en características organolépticas y de estabilidad para seleccionar las más viables para la siguiente fase del estudio.

Discusión: Los resultados mostraron que 12 muestras destacaron por su apariencia más homogénea, sin separación de fases ni turbidez visible. Estas observaciones fueron reforzadas con análisis colorimétricos usando el parámetro L del espacio CIELAB, que mostró una correlación positiva con la claridad visualmente percibida. Esto sugiere que una mayor

luminosidad puede estar asociada con emulsiones más estables y de mejor apariencia cosmética, derivadas de una mayor compatibilidad entre fases.

Conclusiones: Se concluye que el análisis visual y colorimétrico constituye una herramienta útil y objetiva para seleccionar formulaciones ópticas y estéticamente aceptables. Las muestras seleccionadas serán evaluadas en una siguiente fase para validar su eficacia en piel humana y su estabilidad a largo plazo.

25

Referencias:

- Deli, G., Hatziantoniou, S., Nikas, Y., & Demetzos, C. (2009). Solid lipid nanoparticles and nanoemulsions containing ceramides: Preparation and physicochemical characterization. *Journal of Liposome Research*, 19(3), 180-188. <https://doi.org/10.1080/08982100802702046>
- Faria-Silva, A. C., Margarida, A., Ascenso, A., Margarida, H., Marto, J., Gonçalves, L., Carneiro, M., & Simoes, S. (2020). Nanoemulsions for cosmetic products— ScienceDirect. <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/B9780128222867000048>
- Ramirez-Miranda, I., Moguel Ordóñez, Y., & Betancur-Ancona, D. (2023). Bioactive properties of honeys from stingless bees and Apis mellifera bees in the food industry. <https://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/00218839.2022.2146368>

Evaluación *in vitro* de la actividad antitrombótica de péptidos de chía generados por fermentación microbiana

Lilia Tamayo Torres¹, Rafael Rojas Herrera¹, Maira Segura Campos¹

¹Facultad de Ingeniería Química, Universidad Autónoma de Yucatán. Periférico Norte Km. 33.5, Tablaje Catastral 13615, Col. Chuburná de Hidalgo Inn, 97203 Mérida, Yucatán, México.

a12003851@alumnos.uady.mx, torreslilia22@gmail.com, 4010470.

Palabras clave: Chía; péptidos bioactivos; actividad antitrombótica; fermentación láctica.

Introducción: Los eventos tromboticos son la principal causa de mortalidad cardiovascular a nivel global. Debido a que las terapias actuales pueden causar efectos secundarios, actualmente se buscan alternativas naturales como los péptidos derivados de semillas de chía.

Metodología: Este estudio evalúa el potencial antitrombótico de hidrolizados de proteína de chía obtenidos por fermentación láctica en monocultivo con *Lactobacillus plantarum* ATCC 8014 y *Weissella cibaria* H1B. Los hidrolizados con mayor concentración peptídica se obtuvieron a las 9 y 17 h (LP-CPH9 y LP-CPH17) y a las 4 y 8 h (WC-CPH4 y WC-CPH8), respectivamente. Se analizó su capacidad *in vitro* para inhibir la agregación plaquetaria, su actividad anticoagulante (tiempo de tromboplastina parcial activada: TTPa; y tiempo de protrombina: TP) y su capacidad fibrinolítica.

Resultados: Los hidrolizados LP-CPH9 y LP-CPH17, evaluados a 5 mg/mL, inhibieron la agregación plaquetaria en $25.97 \pm 2.1\%$ y $23.26 \pm 1.4\%$, respectivamente. Además, prolongaron el TTPa 11.6 ± 0.93 s y 11.9 ± 0.95 s, y mostraron porcentajes de lisis del coágulo de $6.48 \pm 0.38\%$ y $5.1 \pm 0.6\%$. Por su parte, WC-CPH4 y WC-CPH8 también mostraron efectos destacados: WC-CPH8 inhibió la agregación plaquetaria en $55.67 \pm 6\%$ a 1 mg/mL y WC-CPH4 en $47.28 \pm 2.8\%$ a 5 mg/mL. Ambos presentaron actividad fibrinolítica a 5 mg/mL ($5.82 \pm 0.52\%$ para WC-CPH8 y $5.34 \pm 0.4\%$ para WC-CPH4) y prolongaron el TTPa 14.68 ± 0.69 s y 14.65 ± 1.25 s, respectivamente.

Discusión: Las variaciones en la actividad antitrombótica de los hidrolizados reflejan diferencias en los perfiles peptídicos generados por la cepa microbiana y el tiempo de

fermentación. La notable inhibición de la agregación plaquetaria sugiere una interacción específica con receptores como GPIIb/IIIa o P2Y12 (Ojima et al. 1995; Yang et al. 2022). La prolongación selectiva del TTPa, sin afectar el TP, indica un efecto específico sobre la vía intrínseca de coagulación, lo que podría reducir riesgos de sangrado comparado con terapias convencionales. Adicionalmente, una actividad fibrinolítica moderada contribuye al perfil antitrombótico integral.

Conclusión: Esta investigación respalda la fermentación microbiana como método eficaz para generar péptidos antitrombóticos de chíá, con potencial aplicación en alimentos funcionales para la prevención de eventos cardiovasculares de origen trombótico.

Referencias:

Ojima, Iwao, Subrata Chakravarty, and Qing Dong. (1995). Antithrombotic Agents: From RGD to Peptide Mimetics. *Bioorganic & Medicinal Chemistry* 3(4):337–60.

Yang, Li, Gui-Liang Xie, Jin-Lin Ma, Xiao-Qiong Huang, Yao Gu, Lei Huang, Hai-Yan Chen, and Xi-Lin Ouyang. (2022). Phytochemical Constituents of Camellia Osmantha Fruit Cores with Antithrombotic Activity. *Food Science & Nutrition* 10(5):1510–19.

Estudio de la hidrólisis del anillo lactónico de la ocraceólida A obtenida del extracto de *Elaeodendron trichotomum*.

Claudina Sánchez Ortiz, Rolando David Cáceres Castillo.

Laboratorio de Química Farmacéutica, Facultad de Química, Universidad Autónoma de Yucatán. Mérida, Yucatán, México. a95007219@alumnos.uady.mx, lirio1975@gmail.com. No. Beca 1318722 SECIHCYT.

Palabras clave: derivados ocraceólida A, triterpenos pentacíclicos, γ -lactonas.

28

Introducción: El estudio de los terpenos ha sido de gran interés en las investigaciones científicas debido a las diferentes cualidades químicas y farmacológicas que pueden presentar. Las modificaciones estructurales, en este tipo de compuestos, han producido nuevos derivados con mejores propiedades farmacocinéticas.¹ La ocraceólida A, triterpeno de tipo lupano, ha sido aislada de la corteza de *Elaeodendron trichotomum* y se ha comprobado, en estudios preliminares, su potencial como agente anticancerígeno.²⁻³ El objetivo de este estudio se centra en estudiar los cambios en la estructura del anillo F, una γ -lactona con un sistema α - β insaturado, mediante el mecanismo de reacción de hidrólisis para obtener derivados de la ocraceólida A.

Metodología: Para las separaciones por cromatografía en columna (CC) se utilizaron columnas de vidrio empacadas con SiO_2 . Para los análisis por cromatografía en capa fina se utilizaron cromatofolios de aluminio de 20x20 cm con SiO_2 . En un matraz balón se agregó la ocraceólida A (20 mg, 0.044 mmol) y se adicionó KOH en una solución metanólica al 5%. La mezcla se mantuvo en agitación a temperatura ambiente por 24 h. El disolvente se evaporó a presión reducida. La fase orgánica fue extraída con agua y AcOEt. El crudo fue purificado por columna cromatográfica eluido con CH_2Cl_2 y MeOH.⁴

Resultados y Discusión: 3-oxolup-20(29)-metoxi-30,21 α -olida. Sólido transparente no cristalino, en cuyo espectro de masas de alta resolución (IE+) se observó un ion $[\text{M}^+]$ de m/z 484.7104, calculado para $\text{C}_{31}\text{H}_{48}\text{O}_4$. En los espectros de RMN ^1H y RMN ^{13}C se observaron señales con diferencias principales, con respecto a su precursor, lo que permitió hacer la caracterización del producto derivado. Entre las señales más características se pueden mencionar la presencia de los protones geminales y del grupo metoxilo. A partir de los

resultados experimentales obtenidos, se pudo determinar que las γ -lactonas con sistemas α,β -insaturados presentan una notable resistencia a la apertura del anillo, debido a factores estructurales y electrónicos específicos.

Conclusiones: Los resultados permiten concluir que las γ -lactonas con un sistema α,β -insaturado presentan una buena reactividad como moléculas electrofílicas, lo que permite hacer modificaciones sobre este centro.

Referencias:

1. Ngassapa, O. D.; Soejarto, D. D.; Che, C.-T.; Pezzuto, J. M.; Farnsworth, N. R. New Cytotoxic Lupane Lactones from *Kokoona ochracea*. *J. Nat. Prod.* **1991**, 54 (5), 1353–1359.
2. Sturm, S.; Gil, R. R.; Chai, H.-B.; Ngassapa, O. D.; Santisuk, T.; Reutrakul, V.; Howe, A.; Moss, M.; Besterman, J. M.; Yang, S.-L.; Farthing, J. E.; Tait, R. M.; Lewis, J. A.; O'Neill, M. J.; Farnsworth, N. R.; Cordell, G. A.; Pezzuto, J. M.; Kinghorn, A. D. Lupane Derivatives from *Lophopetalum wallichii* with Farnesyl Protein Transferase Inhibitory Activity. *J. Nat. Prod.* **1996**, 59 (7), 658–663.
3. Herrera-España, A. D., Mena-Rejón, G. J., Hernández-Ortega, S., Quijano, L., & Mirón-López, G. Crystal structure of ochraceolide A isolated from *Elaeodendron trichotomum* (Turcz.) Lundell. *Acta Crystallographica Section E Crystallographic Communications*. **2017**, 73(10), 1475–1478.
4. Tu, H.-Y.; Huang, A.-M.; Wei, B.-L.; Gan, K.-H.; Hour, T.-C.; Yang, S.-C.; Pu, Y.-S.; Lin, C.-N. Ursolic acid derivatives induce cell cycle arrest and apoptosis in NTUB1 cells associated with reactive oxygen species. *Bioorganic & Med. Chem.* **2009**, 17 (20), 7265–7274.

Comparación del efecto del ácido valproico y el butirato de sodio en la diferenciación adipogénica de células troncales de ligamento periodontal

Torres Nájera Anahí^{1,2}, Serralta Interían Angélica^{1,2}, Rivera Solís Rodrigo¹, Rodas Junco Beatriz Adriana^{2,3}.

¹ Facultad de Ingeniería Química, Universidad Autónoma de Yucatán, Periférico Norte Kilómetro 33.5. Mérida, Yucatán, CP 97302.

² Laboratorio de Células Troncales, Facultad de Odontología, Universidad Autónoma de Yucatán, calle 61A x 90 y 92. Mérida, Yucatán, CP 97000.

³ SECIHTI- Facultad de Ingeniería Química, Universidad Autónoma de Yucatán. Periférico Norte Kilómetro 33.5, Mérida, Yucatán, CP 97203.

a17115693@alumnos.uady.mx., anahitorrez88@hotmail.com y No. de becario SECIHTI: 4012629.

Palabras clave: Adipogenesis, Epigenética, Células troncales, Acetilación.

Introducción: Las células troncales de ligamento periodontal (CTLP) constituyen un modelo adecuado para estudiar la adipogénesis por su multipotencialidad ¹. Este proceso se ha analizado principalmente en modelos murinos, dado que su desregulación contribuye a la obesidad². La expresión de *PPARγ*, gen maestro adipogénico, se modula epigenéticamente^{3,4}. Los inhibidores de histonas desacetilasas (HDACis), como el ácido valproico (VPA) y el butirato de sodio (NaBu), regulan la acetilación de H3K9 (H3K9ac)^{5,6}, marca epigenética asociada a la activación transcripcional que favorece la expresión de *PPARγ*⁷.

Metodología: Para evaluar el efecto del VPA y el NaBu en CTLP antes de la inducción adipogénica, se analizó su morfología (tinción con cristal violeta), expresión de ciclinas y genes adipogénicos (RT-qPCR). Los tratamientos con NaBu (1, 2 y 5 mM) y VPA (1, 4 y 8 mM) se aplicaron durante 72 horas. Posteriormente, se indujo la adipogénesis durante 21 días con medio específico. La marca H3K9ac se localizó en las CTLP por inmunocitoquímica usando el anticuerpo anti-H3K9ac, junto con una contratinción nuclear con DAPI. Se analizó la acumulación de lípidos (tinción con rojo oleoso) y la expresión de genes adipogénicos por RT-qPCR.

Resultados: Las concentraciones de 8 mM de VPA y 5mM de NaBu no solo modificaron marcadores epigenéticos (H3K9ac) y el ciclo celular, sino que consistentemente promovieron la

adipogénesis. Este efecto sugiere que ambos compuestos actúan a múltiples niveles para favorecer la diferenciación adipogénica en las CTLP.

Discusión: Los resultados indican que los HDACis mejoran la adipogénesis en las CTLP al regular la H3K9ac y el ciclo celular. En las células troncales (CT) humanas el VPA y el NaBu aumentan la proporción de células en G2/M y los niveles de p21⁸. Además, se ha documentado que la H3K9ac incrementa durante la diferenciación celular mediada por inhibidores epigenéticos^{5,9,10}. En CT porcinas, el NaBu incrementa la expresión de *PPARγ*¹¹. A diferencia del VPA en CTLP aumenta la expresión de *ADIPOQ* (gen adipogénico)⁵.

Conclusiones: Ambos inhibidores (VPA y NaBu) promueven la adipogénesis en CTLP, sin embargo, NaBu es más eficaz. Este efecto podría deberse a su perfil epigenético más potente, posicionándolo como una herramienta para futuras aplicaciones en medicina regenerativa.

Referencias:

- (1) Yamada, Y.; Nakamura-Yamada, S.; Kusano, K.; Baba, S. Clinical Potential and Current Progress of Dental Pulp Stem Cells for Various Systemic Diseases in Regenerative Medicine: A Concise Review. *Int J Mol Sci* 2019, 20 (5), 1132. <https://doi.org/10.3390/ijms20051132>.
- (2) Lee, J.-E.; Ge, K. Transcriptional and Epigenetic Regulation of PPAR γ Expression during Adipogenesis. *Cell Biosci* 2014, 4 (1), 29. <https://doi.org/10.1186/2045-3701-4-29>.
- (3) Argaez-Sosa, A. A.; Rodas-Junco, B. A.; Carrillo-Cocom, L. M.; Rojas-Herrera, R. A.; Coral-Sosa, A.; Aguilar-Ayala, F. J.; Aguilar-Pérez, D.; Nic-Can, G. I. Higher Expression of DNA (de)Methylation-Related Genes Reduces Adipogenicity in Dental Pulp Stem Cells. *Front Cell Dev Biol* 2022, 10, 791667. <https://doi.org/10.3389/fcell.2022.791667>.
- (4) Pant, R.; Firmal, P.; Shah, V. K.; Alam, A.; Chattopadhyay, S. Epigenetic Regulation of Adipogenesis in Development of Metabolic Syndrome. *Front Cell Dev Biol* 2021, 8 (January). <https://doi.org/10.3389/fcell.2020.619888>.
- (5) Serralta-Interian, A.; Toro, J.; Nic Can, G.; Rojas Herrera, R.; Aguilar-Ayala, F. J.; Rodas-Junco, B. Inhibition of Histone Deacetylases Class I Improves Adipogenic Differentiation of Human Periodontal Ligament Cells. *Cell Mol Biol (Noisy-le-grand)* 2024, 70, 40–47. <https://doi.org/10.14715/cmb/2024.70.5.7>.

- (6) Ye, Q.; Zeng, X.; Wang, S.; Zeng, X.; Yang, G.; Ye, C.; Cai, S.; Chen, M.; Li, S.; Qiao, S. Butyrate Drives the Acetylation of Histone H3K9 to Activate Steroidogenesis through PPAR γ and PGC1 α Pathways in Ovarian Granulosa Cells. *The FASEB Journal* 2021, 35. <https://doi.org/10.1096/fj.202000444R>.
- (7) Steger, D. J.; Grant, G. R.; Schupp, M.; Tomaru, T.; Lefterova, M. I.; Schug, J.; Manduchi, E.; Stoeckert, C. J. J.; Lazar, M. A. Propagation of Adipogenic Signals through an Epigenomic Transition State. *Genes Dev* 2010, 24 (10), 1035–1044. <https://doi.org/10.1101/gad.1907110>.
- (8) Lee, S.; Park, J. R.; Seo, M. S.; Roh, K. H.; Park, S. B.; Hwang, J. W.; Sun, B.; Seo, K.; Lee, Y. S.; Kang, S. K.; Jung, J. W.; Kang, K. S. Histone Deacetylase Inhibitors Decrease Proliferation Potential and Multilineage Differentiation Capability of Human Mesenchymal Stem Cells. *Cell Prolif* 2009, 42 (6), 711. <https://doi.org/10.1111/J.1365-2184.2009.00633.X>.
- (9) Kurihara, Y.; Suzuki, T.; Sakaue, M.; Murayama, O.; Miyazaki, Y.; Onuki, A.; Aoki, T.; Saito, M.; Fujii, Y.; Hisasue, M.; Tanaka, K.; Takizawa, T. Valproic Acid, a Histone Deacetylase Inhibitor, Decreases Proliferation of and Induces Specific Neurogenic Differentiation of Canine Adipose Tissue-Derived Stem Cells. *J Vet Med Sci* 2014, 76 (1), 15–23. <https://doi.org/10.1292/jvms.13-0219>.
- (10) Montero-Del-Toro, J. A.; Serralta-Interian, A. A.; Nic-Can, G. I.; Rojas-Herrera, R.; Carrillo-Cocom, L. M.; Rodas-Junco, B. A. Effect of Epigenetic Inhibitors on Adipogenesis in Human Periodontal Ligament Stem Cells. *Odovtos - International Journal of Dental Sciences* 2024, 116–128. <https://doi.org/10.15517/ijds.2024.62008>.
- (11) Tugnoli, B.; Bernardini, C.; Forni, M.; Piva, A.; Stahl, C. H.; Grilli, E. Butyric Acid Induces Spontaneous Adipocytic Differentiation of Porcine Bone Marrow-Derived Mesenchymal Stem Cells. *In Vitro Cell Dev Biol Anim* 2019, 55 (1), 17–24. <https://doi.org/10.1007/s11626-018-0307-x>.

Estudio fitoquímico de hojas de *Maytenus phyllanthoides* Benth

Bárbara Samantha Moreno Flores, Gonzalo J. Mena Rejón, Gumersindo Mirón López, Manlio J. Graniel Sabido
Laboratorio de Química Farmacéutica, Facultad de Química UADY. Calle 43 s/n x 96 Paseo de las Fuentes y 40 Col.
Inalámbrica. C.P. 97069 Mérida, Yucatán, México.

A18123026@alumnos.uady.mx , bmorenof1127@gmail.com

No. Becario SECIHCYT 4012250

Palabras clave: triterpenos, *Maytenus*, Celastraceae, ácido-16 β -hidroxi-ursólico

Introducción. Celastraceae es una familia conocida por su diversidad morfológica y la producción de metabolitos con potencial bioactivo.¹ El género *Maytenus*, con alrededor de 300 especies en climas tropicales, destaca por su abundancia y por incluir especies con propiedades medicinales.² En este contexto, el presente trabajo se enfoca en el estudio de los terpenoides presentes en las hojas de *Maytenus phyllanthoides* Benth.

Metodología. Se utilizaron hojas secas y molidas de *M. phyllanthoides*, maceradas en metanol (MeOH) y sometidas a extracción líquido-líquido con CH₂Cl₂ y AcOEt, obteniéndose extractos crudos de 50 g y 2.9 g, respectivamente. El extracto de CH₂Cl₂ fue fraccionado mediante cromatografía en columna y en capa delgada preparativa, en gel de sílice de fase normal y reversa. Los compuestos se caracterizaron mediante RMN, espectrometría de masas (EM), IRTF, CLAE-EM y difracción de rayos X.

Resultados:. Se aislaron ácido oleanólico, ácido ursólico, 16 β -hidroxi-uvaol y un compuesto denominado M5.b (ácido-16 β -hidroxi-ursólico). El análisis por CLAE-EM del extracto CH₂Cl₂ mostró dos componentes principales, correspondientes a los ácidos oleanólico y ursólico, en proporción 4:3, confirmada por RMN-¹H. Además, se identificaron compuestos más polares, posiblemente derivados de estos ácidos.

Discusión. El espectro de RMN-¹H de M5.b presentó señales características de triterpeno de esqueleto ursano. Por RMN-¹³C se revelaron 30 carbonos, incluyendo un carbonilo, un doble enlace y señales de metinos hidroxilados. La comparación con las señales del ácido ursólico sugiere que M5.b es un derivado hidroxilado. Para la definición de la posición del segundo hidroxilo se realizaron experimentos de COSY, HMBC y HSQC. Se determinó que la posición

16 contenía el hidroxilo y la orientación se estableció por NOESY. Finalmente fue identificado como ácido-16 β -hidroxi-ursólico. Su estructura fue confirmada por difracción de rayos X, mostrando el esqueleto triterpénico de cinco anillos fusionados en trans excepto por el anillo E (cis).

Este estudio reporta por primera vez la presencia de 16 β -hidroxi-uvaol en Celastraceae y propone su papel como precursor biosintético del ácido-16 β -hidroxi-ursólico, así como una serie de rutas biosintéticas basadas en lo reportado.

Conclusiones. Se identificó al ácido-16 β -hidroxi-ursólico como un compuesto nuevo, con estructura cristalina determinada. Se reporta por primera vez su presencia y la de 16 β -hidroxi-uvaol en Celastraceae, ampliando el conocimiento sobre sus metabolitos.

Referencias.

- (1) Camargo, K. C.; de Aguilar, M. G.; Aguiar Moraes, A. R.; de Castro, R. G.; Szczerbowski, D.; Marinho Miguel, E. L.; Oliveira, L. R.; Sousa, G. F.; Vidal, D. M.; Duarte, L. P. Pentacyclic Triterpenoids Isolated from Celastraceae: A Focus in the ^{13}C -NMR Data. *Molecules* **2022**, 27 (3), 959. <https://doi.org/10.3390/molecules27030959>.
- (2) Wagner, R. Browning. H. Overview of Celastraceae Compounds: Chemistry, Chemotaxonomy, Biosynthesis, Pharmacology. *Phytochemistry* **1978**, 17 (11), 1821–1858. [https://doi.org/10.1016/S0031-9422\(00\)88719-1](https://doi.org/10.1016/S0031-9422(00)88719-1).

Evaluación de la participación de las dioxigenasas de ADN TEN-ELEVEN TRANSLOCATION durante la inducción adipogénica de células troncales de la pulpa dental.

Meshoulam-Alamilla Max ^{1*}, Rojas-Herrera Rafael ¹, Nic-Can Geovanny I. ^{2,3}.

¹ Facultad de Ingeniería Química, Universidad Autónoma de Yucatán, Periférico Norte, Kilómetro 33.5. Mérida, Yucatán, CP 97302.

² Laboratorio Traslacional de Células Troncales de Origen Bucal, Facultad de Odontología, Universidad Autónoma de Yucatán, Calle 61A x 90 y 92. Mérida, Yucatán, CP 97000.

³ SECIHTI-Facultad de Ingeniería Química, Universidad Autónoma de Yucatán. Periférico Norte Kilómetro 33.5. Mérida, Yucatán, CP 97302.

*Correspondencia:

A23220554@alumnos.uady.mx

*Número de becario SECIHTI: CVU 1318583

Palabras clave: Adipogénesis, Células troncales de pulpa dental, Metilación del ADN.

Introducción: Durante la diferenciación adipogénica de células troncales, diversos factores son regulados epigenéticamente mediante metilación del ADN. Por esto, la modulación de las enzimas responsables de la desmetilación del ADN como las TEN-ELEVEN TRANSLOCATION 1-3 (TET1-3), podrían apoyar al entendimiento de la diferenciación adipogénica en líneas celulares no comprometidas que derivan del ectodermo como las células troncales de pulpa dental (CTPD).¹⁻⁴

Metodología: Las CTPDs fueron inducidas hacia la adipogénesis durante 15 días en presencia de diferentes estímulos, para determinar el de mejor rendimiento evidenciado con mayor tamaño de vacuolas lipídicas (detectados con aceite rojo O) y mayor expresión de marcadores adipogénicos (confirmados mediante PCR). Se realizó el perfil de expresión de algunos marcadores adipogénicos mediante qPCR a diferentes tiempos posterior al inicio del estímulo adipogénico. Además, fueron utilizados ARN de interferencia para silenciar de manera específica a TET1-3 y analizados por qPCR 72 horas posteriores a la transfección y 12 días posteriores a la inducción adipogénica. Los resultados de expresión se analizaron mediante

ANOVA de una vía utilizando el software GraphPad Prism para detectar diferencias significativas respecto al control ($\alpha=0.05$).

Resultados: La modificación del medio de cultivo, eliminando factores que afectan la vía de las prostaglandinas genera una mayor diferenciación adipogénica de las CTPDs, corroborados por la tinción de las vacuolas lipídicas y la expresión positiva de genes asociados a dicho proceso. Se caracterizó el proceso adipogénico con el medio de cultivo con mejor rendimiento y encontró también que el silenciamiento de TET1 y TET2 afecta de manera importante la diferenciación de las CTPDs a adipocitos ya sea retrasando el proceso o alterando el perfil de las células resultantes, el silenciamiento de TET3 impactó el proceso de manera más discreta.

Discusión: Contrario a lo reportado en literatura, se ha encontrado una respuesta adipogénica ~80% en CTPDs debido a una modificación del estímulo adipogénico, corroborado por la expresión de genes asociados al linaje adipogénico confirma lo observado mediante la tinción de los adipocitos. Asimismo, se ha encontrado mediante el silenciamiento de TETs en células inducidas a adipogénesis que todos los miembros de la familia TET tienen un rol relevante en el proceso adipogénico.⁴⁻⁷

Conclusiones: La modificación del estímulo adipogénico carente de moléculas que afecten la vía de las prostaglandinas promueve una mejor respuesta adipogénica de las CTPDs en inducción. Se cuenta con información al respecto del perfil de algunos marcadores adipogénicos en el proceso de inducción. TET1-3 están involucradas de maneras distintas en el proceso de diferenciación.

Referencias:

- (1) Balam-Lara, J. A.; Carrillo-Cocom, L. M.; Rodas-Junco, B.; Lizama, L. V.; Nic-Can, G. TEN ELEVEN TRANSLOCATION 2 (TET2) Improves the Adipogenic Potential of Dental Pulp Stem Cells. *J Mex Chem Soc* 2023, 67 (3), 305–313. <https://doi.org/10.29356/jmcs.v67i3.2057>.
- (2) Rodas-Junco, B. A.; Canul-Chan, M.; Rojas-Herrera, R. A.; de-la-Peña, C.; Nic-Can, G. I. Stem Cells from Dental Pulp: What Epigenetics Can Do with Your Tooth. *Frontiers in Physiology*. Frontiers Media S.A. December 6, 2017. <https://doi.org/10.3389/fphys.2017.00999>.



- (3) Nic-Can, G. I.; Rodas-Junco, B. A.; Carrillo-Cocom, L. M.; Zepeda-Pedreguera, A.; Peñaloza-Cuevas, R.; Aguilar-Ayala, F. J.; Rojas-Herrera, R. A. Epigenetic Regulation of Adipogenic Differentiation by Histone Lysine Demethylation. *Int J Mol Sci* 2019, 20 (16), 3918. <https://doi.org/10.3390/ijms20163918>.
- (4) Argaez-Sosa, A. A.; Rodas-Junco, B. A.; Carrillo-Cocom, L. M.; Rojas-Herrera, R. A.; Coral-Sosa, A.; Aguilar-Ayala, F. J.; Aguilar-Pérez, D.; Nic-Can, G. I. Higher Expression of DNA (de)Methylation-Related Genes Reduces Adipogenicity in Dental Pulp Stem Cells. *Front Cell Dev Biol* 2022, 10. <https://doi.org/10.3389/fcell.2022.791667>.
- (5) Yano, N.; Fedulov, A. V. Targeted DNA Demethylation: Vectors, Effectors and Perspectives. *Biomedicines*. MDPI May 1, 2023. <https://doi.org/10.3390/biomedicines11051334>.
- (6) Cakouros, D.; Hemming, S.; Gronthos, K.; Liu, R.; Zannettino, A.; Shi, S.; Gronthos, S. Specific Functions of TET1 and TET2 in Regulating Mesenchymal Cell Lineage Determination. *Epigenetics Chromatin* 2019, 12 (1). <https://doi.org/10.1186/s13072-018-0247-4>.
- (7) Qian, H.; Zhao, J.; Yang, X.; Wu, S.; An, Y.; Qu, Y.; Li, Z.; Ge, H.; Li, E.; Qi, W. TET1 Promotes RXR α Expression and Adipogenesis through DNA Demethylation. *Biochim Biophys Acta Mol Cell Biol Lipids* 2021, 1866 (6). <https://doi.org/10.1016/j.bbalip.2021.158919>.



Desarrollo de un método de RMN para la cuantificación de ochraceólida A

Arias López Nataly de Jesús*, Ceballos Cruz Jimmy Josué, Mena Rejón Gonzalo J.¹

¹Laboratorio de química farmacéutica, Facultad de Química, Universidad Autónoma de Yucatán, Mérida, Yucatán, México.

*a13000512@alumnos.uady.mx // arias.nataly@outlook.com // No. de becario SECIHTI 1319262.

Palabras clave: Ochraceólida A, *E. trichotomum*, qRMN-¹H, Ultrasonido.

38

Introducción: *Elaeodendron trichotomum* es un árbol que puede ser encontrado en Yucatán, a partir de él se ha aislado ochraceólida A, un triterpeno con actividad contra VIH y líneas celulares de cáncer.^{1,2} En el presente trabajo se desarrolló un método para extraer y cuantificar dicho compuesto a partir de la corteza de esta planta. La extracción se llevó a cabo mediante ultrasonido, y la cuantificación, mediante RMN-¹H.

Metodología: La corteza de *E. trichotomum* fue sometida a extracción asistida por ultrasonido con diclorometano para evaluar el impacto de los factores: proporción material vegetal-disolvente, tiempo y amplitud de sonda. Se establecieron parámetros adecuados de RMN-¹H para cuantificar ochraceólida A en los extractos, y se validó la medición bajo los lineamientos del ICH. Finalmente, el método fue aplicado en muestras recolectadas entre abril de 2023 y febrero de 2024.

Análisis estadístico: El análisis de los factores de extracción se realizó por superficie de respuesta, mientras que para la comparación de resultados de la aplicación del método se realizaron ANOVA y prueba de Tukey.

Resultados: El único factor con efecto significativo sobre la extracción del analito fue la proporción material vegetal-disolvente, estableciendo los mejores parámetros de extracción como: proporción 1:15 (g/mL), 40 min y amplitud de sonda de 67%. Los parámetros seleccionados para la cuantificación por RMN-¹H permitieron obtener una relación señal-ruído (RSR) de 354.75. La validación proporcionó una linealidad con R² de 0.9993, coeficientes de variación de 0.68% para precisión intermedia y 0.27% para repetibilidad, límites de detección y cuantificación de 0.03 y 0.10 mg, respectivamente, y se obtuvo 97.17% de recuperación. Este

método permitió establecer que existen diferencias en el contenido de ochraceólida A en las muestras analizadas.

Discusión: La extracción mejora al aumentar el disolvente, esto debido a la reducción de viscosidad de la mezcla que favorece la transferencia de masa.³ La RSR superó lo establecido por la ENFSI, confirmando los parámetros óptimos de cuantificación,⁴ mientras que la validación fue comparable con otros trabajos por RMN-¹H.⁵ Las variaciones de ochraceólida A podrían deberse a múltiples factores.⁶

Conclusiones: La RMN es útil para la cuantificación de ochraceólida A en extractos diclorometánicos de corteza de *E. trichotomum*, ofreciendo resultados confiables.

Referencias.

1. Herrera, Á. D.; Mena, G. J.; Hernández, S.; Quijano, L.; Mirón, G. Crystal structure of ochraceolide A isolated from *Elaeodendron trichotomum* (Turcz.) Lundell. *Acta. Cryst.* [En línea] **2017**, 73, 1475- 1478.
2. Herrera, A. D.; Us, J., Hernández, S.; Mirón, G.; Quijano, L.; Villanueva, J. R.; Mena, G. J. Synthesis structure analysis and activity against breast and cervix cancer cells of a triterpenoid thiazole derived from ochraceolide A. *J. Mol. Struct.* [En línea] **2020**, 1204, 1-21.
3. Shen, L.; Pang, S.; Zhong, M.; Sun, Y.; Qayum, A.; Liu, Y.; Rashid, A.; Xu, B.; Liang, Q.; Ma, H.; Ren, X. A Comprehensive Review of Ultrasonic Assisted Extraction (UAE) for Bioactive Components: Principles, Advantages, Equipment, and Combined Technologies. *Ultrason Sonochem* [En línea] **2023**, 101, 1–24.
4. Schoenberger, T. Guideline for QNMR Analysis. 1st ed. ENFSI: Alemania November 6, 2019, pp 1–24.
5. Palu, D.; Bighelli, A.; Casanova, J.; Paoli, M. Identification and Quantitation of Ursolic and Oleanolic Acids in *Ilex aquifolium* L. Leaf Extracts Using ¹³C and ¹H-NMR Spectroscopy. *Molecules* [En línea] **2019**, 24 (23), 4413–4427.
6. Rivas Aguayo, Á. G. Variación Estacional y Actividad Antiproliferativa de Triterpenos de Tipo Lupano Obtenidos Del Extracto Metanólico de *Phoradendron watti*. Tesis Maestría, CICY, Mérida, Yucatán, México, junio, 2022.

Evaluación de la marca epigenética Histona 3 lisina 9 dimetilada en el proceso de diferenciación adipogénica de células troncales de ligamento periodontal.

Autores: IBT. Rivero Ancona Gabriel Alejandro^{1,3}, Dra. Rodas Junco Beatriz A.^{2,3}, Dr. Rojas Herrera Rafael A.¹, Dra. Serralta Interián Angélica Anahí^{2,3}

¹Facultad de Ingeniería Química UADY, Periférico Norte, Kilómetro 33.5 Tablaje Catastral 13615 Chuburná de Hidalgo Inn, C.P. 97203

²SECIHTI-Facultad de Ingeniería Química UADY, Periférico Norte, Kilómetro 33.5 Tablaje Catastral 13615 Chuburná de Hidalgo Inn, C.P. 97203

³Laboratorio de Células Troncales, Facultad de Odontología UADY, Calle 61-A X Av. Itzáes, Col. Centro, C.P. 97000.

Correo del ponente: a17115656@alumnos.uady.mx; gabrielrivero_1999@outlook.com (Beca SECIHTI #4041589)

Palabras clave: Células troncales dentales, H3K9me2, Adipogénesis.

Resumen:

Introducción: La obesidad es un padecimiento global y un factor de riesgo para múltiples enfermedades. Su desarrollo está influenciado por factores genéticos que promueven la proliferación de tejido adiposo¹. Para estudiar la adipogénesis, se emplean modelos celulares, entre ellos, las células troncales de ligamento periodontal (CTLPs), las cuales permiten analizar mecanismos epigenéticos como la dimetilación de la histona H3 en el residuo lisina 9 (H3K9me2), marca asociada a la represión del programa adipogénico². Esta modificación es regulada por las metiltransferasas GLP/G9a. El uso del inhibidor BIX-01294 permite estudiar su dinámica en CTLPs durante el proceso adipogénico, lo que contribuye a la comprensión de los mecanismos epigenéticos involucrados en la obesidad y a la identificación de blancos terapéuticos.

Metodología: Se realizaron ensayos de diferenciación multilínea en la línea celular LPM19. Posteriormente, utilizando las líneas LPM19 y LPH13, se evaluó la viabilidad celular mediante azul de tripán, empleando concentraciones crecientes de BIX-01294. Tras determinar la concentración óptima (1.3 μ M, 48h), se indujo la diferenciación adipogénica. Los cambios morfológicos se monitorearon por microscopía y la acumulación lipídica se evaluó mediante tinción con aceite rojo oleoso después de 21 días de diferenciación.

Resultados: La línea celular LPM19 exhibió una capacidad limitada de diferenciación adipogénica, osteogénica y condrogénica. Concentraciones de BIX-01294 mayores a 1.3 μM redujeron la viabilidad celular a valores inferiores al 80%. El tratamiento con BIX-01294 (1.3 μM , 48h) indujo cambios morfológicos tempranos como la formación de depósitos lipídicos significativamente más pequeños en comparación con el grupo control.

Discusión: Culmes et al. (2013) reportaron que el tratamiento con BIX-01294 (1.25 μM , 48h) promovió la diferenciación angiogénica de células troncales humanas³ lo cual es consistente con nuestros hallazgos. En paralelo, Li et al. (2012) demostraron que una concentración de 2 μM de BIX-01294 induce la adipogénesis en la línea celular murina 3T3-L1⁴, observación que concuerda con los cambios morfológicos tempranos de diferenciación que se identificaron en las CTLPs.

Conclusiones: Los cambios morfológicos observados en CTLPs tratadas con BIX-01294 (1.3 μM) sugieren un posible efecto en la adipogénesis, sin embargo, se requieren análisis moleculares adicionales (expresión de genes adipogénicos y niveles de H3K9me2) para confirmar su impacto en este proceso.

Referencias:

- (1) Longo, M.; Zatterale, F.; Naderi, J.; Parrillo, L.; Formisano, P.; Raciti, G. A.; Beguinot, F.; Miele, C. Adipose Tissue Dysfunction as Determinant of Obesity-Associated Metabolic Complications. *Int J Mol Sci* **2019**, 20 (9). <https://doi.org/10.3390/ijms20092358>.
- (2) Wang, L.; Xu, S.; Lee, J. E.; Baldrige, A.; Grullon, S.; Peng, W.; Ge, K. Histone H3K9 Methyltransferase G9a Represses PPAR γ Expression and Adipogenesis. *EMBO Journal* **2013**, 32 (1), 45–59. <https://doi.org/10.1038/emboj.2012.306>.
- (3) Culmes, M.; Eckstein, H. H.; Burgkart, R.; Nüssler, A. K.; Guenther, M.; Wagner, E.; Pelisek, J. Endothelial Differentiation of Adipose-Derived Mesenchymal Stem Cells Is Improved by Epigenetic Modifying Drug BIX-01294. *Eur J Cell Biol* **2013**, 92 (2), 70–79. <https://doi.org/10.1016/j.ejcb.2012.11.001>.
- (4) Li, S.-F.; Guo, L.; Qian, S.-W.; Liu, Y.; Zhang, Y.-Y.; Zhang, Z.-C.; Zhao, Y.; Shou, J.-Y.; Tang, Q.-Q.; Li, X. G9a Is Transactivated by C/EBP β to Facilitate Mitotic Clonal Expansion during 3T3-L1 Preadipocyte Differentiation. *American Journal of Physiology-Endocrinology and Metabolism* **2013**, 304 (9), E990–E998. <https://doi.org/10.1152/ajpendo.00608.2012>.

Evaluación de la capacidad de remoción de tintes azoicos rojos por medio de nanopartículas de óxido de zinc dopadas con metales alcalinos

Gamboa Sosa Jazmín María, González Chan Irving Josué, Ruiz Ciau Durcy Verénice

Facultad de Química, Universidad Autónoma de Yucatán, Calle 43 x calle 90 #613x Col. Inalámbrica, Mérida, Yucatán México.

Correo Institucional: a15004062@alumnos.uady.mx

Correo Personal: jaz.gamboasosa@gmail.com.

No. de Becario SECIHCT: 4041553

Palabras clave: Fotocatálisis, Nanopartículas, Tintes azoicos, Óxido de zinc.

Introducción: La contaminación por tintes azoicos es un problema ambiental grave debido a su toxicidad y la baja eficiencia de los métodos de tratamiento convencionales (1-3), por lo que este proyecto propone el uso de nanopartículas de óxido de zinc (ZnO) dopadas con sodio (Na) y potasio (K) como fotocatalizadores (4,5), empleando el método sol-gel con extractos de *Citrus aurantium* L.

Metodología: El extracto etanólico de la naranja se combina con acetato de zinc y los dopantes para formar las nanopartículas, que posteriormente son calcinadas a 800 °C y caracterizadas mediante FTIR, XRD, XPS y UV-Vis.

Resultados: El espectro FTIR exhibe una banda vibracional alrededor de 500 cm⁻¹ atribuida a la vibración de enlace Zn–O, sin evidencias de nuevas bandas funcionales tras el dopaje. Los difractogramas de XRD muestran picos definidos correspondientes a planos de la fase hexagonal tipo wurtzita, sin desplazamientos ni fases secundarias. El análisis XPS confirmó la presencia de Zn 2p (1021.1 eV), O 1s (529.94 eV), Na (3.9% at.) y K (1.64% at.). Las curvas de absorción UV-Vis indicaron una disminución del band gap en las muestras dopadas (3.18 eV) en comparación con el ZnO no dopado (3.22 eV).

Discusión: La invariabilidad estructural observada en XRD y la ausencia de modificaciones químicas en FTIR sugieren que los dopajes fueron incorporados de forma efectiva sin inducir distorsiones apreciables en la red cristalina del ZnO. El análisis XPS respalda esta incorporación superficial o intersticial. La ligera disminución en la energía de banda prohibida puede atribuirse

a la creación de niveles de energía intermedios, lo cual favorece una mayor absorción en la región UV y podría potenciar la actividad fotocatalítica bajo irradiación.

Conclusiones: El ZnO se dopó con Na y K sin alterar la estructura cristalina como lo demuestra los resultados de FTIR, XPS y XRD. La reducción del band gap mejora la absorción UV lo que pudiese optimizar la eficiencia fotocatalítica.

Referencias:

- (1) Aguilar, A.; de León, L. D.; Forgionny, A.; Acelas Soto, N. Y.; Mendoza, S. R.; Zárate, A. I. A Systematic Review on the Current Situation of Emerging Pollutants in Mexico: A Perspective on Policies, Regulation, Detection, and Elimination in Water and Wastewater. *Science of the Total Environment [En línea]* **2023**, 905. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2023.167426>.
- (2) Yashni, G.; AlGheethi, A.; Mohamed, R. M. S. R.; Arifin, S. N. H.; Shanmugan, V. A.; Kassim, A. H. M. Photocatalytic Degradation of Basic Red 51 Dye in Artificial Bathroom Greywater Using Zinc Oxide Nanoparticles. *Materials Today: Proceedings [En línea]* **2020**, 31, 136–139. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2020.01.395>.
- (3) Medina-Acosta, M.; Chinchillas-Chinchillas, M. J.; Garrafa-Gálvez, H. E.; Garcia-Maró, C. A.; Rosas-Casarez, C. A.; Lugo-Medina, E.; Luque-Morales, P. A.; Soto-Robles, C. A. Photocatalytic Degradation of Four Organic Dyes Present in Water Using ZnO Nanoparticles Synthesized with Green Synthesis Using Ambrosia Ambrosioides Leaf and Root Extract. *Processes [En línea]* **2024**, 12 (11), 2456. <https://doi.org/10.3390/pr12112456>.
- (4) Kumari, H.; Sonia; Suman; Ranga, R.; Chahal, S.; Devi, S.; Sharma, S.; Kumar, S.; Kumar, P.; Kumar, S.; Kumar, A.; Parmar, R. A Review on Photocatalysis Used For Wastewater Treatment: Dye Degradation. *Water, Air, and Soil Pollution [En línea]* **2023**, 234 (6). <https://doi.org/10.1007/s11270-023-06359-9>.
- (5) Chen, W.; Zhang, Jin.; Joly, A. Optical Properties and Potential Applications of Doped Semiconductor Nanoparticles. *Doped Semiconductor Nanoparticles J. Nanosci. Nanotech* **2004**, 4 (8), 919–947. <https://doi.org/10.1166/jnn.2004.142>.

Aerogeles de celulosa bacteriana funcionalizados con grupos amino para la remoción de CO₂, colorantes y metales pesados: una aproximación desde cultivos de kombucha

Sergio Diego Domínguez Ochoa, Cristian Carrera Figueiras, Barrón Zambrano Jesús Alberto

A18019517@alumnos.uady.mx, No. SECIHCYT 2057691

Palabras clave: Aerogeles funcionalizados, Celulosa Bacteriana, Metales pesados, Remediación ambiental

44

Introducción: El uso de productos químicos sintéticos y las modificaciones antropogénicas ha intensificado la contaminación ambiental por compuestos como CO₂, colorantes industriales y metales pesados, lo cual representa un problema crítico en el contexto del cambio climático. Ante esta problemática, se requieren materiales adsorbentes sostenibles, eficientes y regenerables. En este trabajo se propone el estudio de aerogeles de celulosa bacteriana (CB), obtenidos a partir del SCOBY (colonia simbiótica de bacterias y levaduras) utilizado en la producción de kombucha, como plataforma para la remoción de contaminantes en fase acuosa y gaseosa. Los aerogeles son sólidos ultraporosos obtenidos mediante técnicas como la liofilización, a partir de una red tridimensional que conserva su estructura tras eliminar el líquido. Se funcionalizarán con grupos amino mediante silanización con 3-aminopropiltrietoxisilano (APTES), con el objetivo de evaluar el efecto de la modificación química sobre su capacidad de adsorción de metales pesados, colorantes y CO₂ para remoción de contaminantes.

Metodología: Se emplearán hidrogeles de CB derivados de SCOBY, suministrados por un proveedor local. Estos se someterán a pretratamiento, liofilización y caracterización morfoestructural. Posteriormente, se funcionalizarán con (3-aminopropil)-trietoxisilano (APTES) para incorporar grupos amino en su estructura superficial. Los materiales resultantes se analizarán mediante FTIR, SEM, TGA, y BET. La capacidad de adsorción se evaluará utilizando soluciones acuosas de azul de metileno y metales pesados (Pb²⁺ y Cd²⁺), considerando factores como pH y tiempo de contacto. Asimismo, se estudiará la captura de CO₂ en fase gaseosa por fisisorción. Los datos experimentales se ajustarán a modelos cinéticos e isotérmicos para interpretar los mecanismos de adsorción.

Resultados esperados: Se espera que la funcionalización con grupos amino incremente la capacidad de adsorción de los aerogeles, gracias a la presencia de sitios activos capaces de interactuar con contaminantes mediante enlaces electrostáticos, de hidrógeno y quelación. Se prevé que estos materiales ofrezcan una solución versátil y ambientalmente sostenible para la remediación de aguas contaminadas y la captura de CO₂, con potencial de aplicación en diversos procesos bajo los principios de la química verde.

45

Referencias:

- (1) Badawi, A. K.; Elkodous, M. A.; Ali, G. A. M. Recent Advances in Dye and Metal Ion Removal Using Efficient Adsorbents and Novel Nano-Based Materials: An Overview. *RSC Adv.* **2021**, 11 (58), 36528–36553. <https://doi.org/10.1039/D1RA06892J>.
- (2) Revin, V. V.; Pestov, N. A.; Shchankin, M. V.; Mishkin, V. P.; Platonov, V. I.; Uglanov, D. A. A Study of the Physical and Mechanical Properties of Aerogels Obtained from Bacterial Cellulose. *Biomacromolecules* **2019**, 20 (3), 1401–1411. <https://doi.org/10.1021/acs.biomac.8b01816>.
- (3) Voicu, S. I.; Thakur, V. K. Aminopropyltriethoxysilane as a Linker for Cellulose-Based Functional Materials: New Horizons and Future Challenges. *Current Opinion in Green and Sustainable Chemistry* **2021**, 30, 100480. <https://doi.org/10.1016/j.cogsc.2021.100480>.
- (4) Pereira, A. L. S.; Feitosa, J. P. A.; Morais, J. P. S.; Rosa, M. de F. Bacterial Cellulose Aerogels: Influence of Oxidation and Silanization on Mechanical and Absorption Properties. *Carbohydrate Polymers* **2020**, 250, 116927. <https://doi.org/10.1016/j.carbpol.2020.116927>.

Evaluación Antiparasitaria e Inmunomoduladora de la Mezcla de Benznidazol con Óxido de β -Cariofileno en un Modelo Murino de Infección Crónica con *Trypanosoma cruzi*.

Luis P. López López¹, Víctor E. Arana Argáez¹, Glendy M. Polanco Hernández¹,

1. Facultad de Química de la Universidad Autónoma de Yucatán.
2. Centro de Investigaciones Regionales "Dr. Hideyo Noguchi".

Correo: a18019532@alumnos.uady.mx, lopezlz.luis27@gmail.com

No. Becario SECIHCYT: 4012442

Palabras clave: *Trypanosoma cruzi*, antiparasitario, inmunomodulador, óxido de β -cariofileno.

Introducción: La enfermedad de Chagas es un problema de salud pública causado por el parásito *Trypanosoma cruzi*¹. Durante la fase crónica de esta enfermedad, la infección genera un agotamiento de linfocitos T. Esto produce la reducción de la eliminación de la infección intracelular.²

El tratamiento para esta enfermedad posee grandes limitaciones. Los fármacos actuales, poseen efectos secundarios, alta toxicidad y baja eficacia en fase crónica, por lo que la terapia combinada es una estrategia prometedora para contrarrestar esta problemática¹. Con base a estos, este trabajo tiene la finalidad de evaluar la actividad toxicológica subaguda y tripanocida de la mezcla de benznidazol (BNZ) y óxido de β -cariofileno (BCPO) en modelos *in vivo*.

Metodología: Ratones BALB/c machos fueron tratados por 15 días con la mezcla, durante ese tiempo se monitoreó el peso y cambios en su comportamiento. Al finalizar el ensayo, se extrajo sangre para evaluar biometría y química sanguínea. También se extrajo hígado y riñón para su observación por microscopia.

Ratones BALB/c hembras se infectaron con *Trypanosoma cruzi*. En el día 45 post-infección se inició la administración de la mezcla por 15 días. Al finalizar se extrajo sangre para determinar la concentración de subpoblaciones de Linfocitos T por citometría de flujo, suero para cuantificar el perfil de citocinas anti y proinflamatorias mediante métodos de ELISA, y corazón para la cuantificación de nidos de amastigotes mediante microscopia.

Resultados: La mezcla no mostró signos de toxicidad subaguda, incluso disminuyó el efecto toxicológico del BNZ. Aunado, disminuyó el número y tamaño de los nidos de amastigotes. Los

ratones también mostraron un aumento de las citocinas proinflamatorias, así como en un aumento de linfocitos T CD8.

Discusión: Debido a sus propiedades del BCPO, la toxicidad subaguda disminuyó en los ratones tratados con la mezcla³. Así mismo, el aumento de citocinas proinflamatorias y linfocitos CD8, puede significar una activación de la eliminación de la infección intracelular por medio del sistema inmunológico⁴. Esto puede ser una causa del aumento de la actividad tripanocida de la mezcla.

Conclusiones: La mezcla de BNZ con BCPO no genera toxicidad subaguda, pero si potencia el efecto tripanocida e inmunomodulador del tratamiento a nivel pre-clínico.

Referencias:

- (1) de Sousa, A. S.; Vermeij, D.; Ramos, A. N.; Luquetti, A. O. Chagas Disease. *Lancet* **2024**, 403 (10422), 203–218. [https://doi.org/10.1016/S0140-6736\(23\)01787-7](https://doi.org/10.1016/S0140-6736(23)01787-7).
- (2) Pérez-Antón, E.; Egui, A.; Thomas, M. C.; Simón, M.; Segovia, M.; López, M. C. Immunological Exhaustion and Functional Profile of CD8+ T Lymphocytes as Cellular Biomarkers of Therapeutic Efficacy in Chronic Chagas Disease Patients. *Acta Trop.* **2020**, 202 (July 2019), 105242. <https://doi.org/10.1016/j.actatropica.2019.105242>.
- (3) Quintero, W. L.; Moreno, E. M.; Milena, S.; Pinto, L.; Sanabria, S. M.; Stashenko, E.; García, L. T. Antioxidant Properties of Essential Oil Fractions of *Lippia Alba* (Verbenaceae). **2021**, 6, 1–16.
- (4) González-Tafoya, E.; Diupotex, M.; Zamora-Chimal, J.; Salaiza-Suazo, N.; Ruiz-Remigio, A.; Becker, I. TNF Contributes to T-Cell Exhaustion in Chronic L. Mexicana Infections of Mice through PD-L1 up-Regulation. *Cell. Immunol.* **2020**, 358 (March), 104196. <https://doi.org/10.1016/j.cellimm.2020.104196>.

Estandarización del ensayo de scratch para evaluar el potencial cicatrizante in vitro del extracto etanólico de Bursera simaruba en células del ligamento periodontal

Luis E. Puc Kantún^{1*}, Beatriz A. Rodas Junco², Diana Y. Escalante Réndiz¹

¹Facultad de Ingeniería Química, Universidad Autónoma de Yucatán. Periférico Nte. Km. 33.5, T.C. 13615, Col. Chuburná de Hidalgo Inn, Mérida, Yucatán, México. CP. 97203. ²SECIHTI-Facultad de Ingeniería Química, Universidad Autónoma de Yucatán. *Correos: a17115646@alumnos.uady.mx, luis.puc.katun@gmail.com, No. de becario SECIHTI: 4041631

48

Palabras clave: Bursera simaruba, cicatrización, extracto vegetal, ligamento periodontal

Introducción: Los procedimientos quirúrgicos en odontología afectan tejidos del periodonto, como el ligamento periodontal, y diversos factores pueden retrasar su cicatrización. Una alternativa para promover la cicatrización es el uso de plantas medicinales, por su contenido de compuestos bioactivos. Bursera simaruba, utilizada tradicionalmente para lesiones cutáneas, podría presentar actividad cicatrizante evaluable in-vitro mediante el “scratch assay”¹. Este estudio tiene como objetivo establecer las condiciones experimentales para evaluar el potencial cicatrizante in-vitro del extracto etanólico de hojas de B. simaruba (EE-HBS) en células de ligamento periodontal (CLP).

Metodología: Las hojas de B. simaruba se recolectaron al norte de Mérida (21°02'54"N, 89°38'34"O), se secaron en horno de convección a 45°C por 48 h y se pulverizaron. Para la obtención del EE-HBS, 25 g del material se maceraron en 250 mL de etanol (96%), con agitación por 48 h; la solución se filtró y concentró a presión reducida a 45°C. Dado que el EE-HBS se disolvió en medio con dimetilsulfóxido (DMSO), se evaluó previamente el efecto del DMSO (0.05%-1%) sobre la viabilidad de CLP mediante el “MTT assay”². Para la estandarizar el “scratch assay” se evaluaron: densidad celular, concentración de suero fetal bovino, diámetro de puntas para raspado y captura de campos. El “scratch assay” consistió en generar un rasguño sobre la monocapa celular, aplicar tratamientos y seguimiento fotográfico por 48 h para cuantificar la migración celular.

Resultados: El rendimiento de extracción del EE-HBS fue de 7.5%. El DMSO a concentraciones $\leq 0.5\%$ (v/v), no afectó la viabilidad de las CLP. Las condiciones estandarizadas

del “scratch assay”, incluyen placas de 12 pocillos con 1×10^5 células/pozo, usando puntas de 200 μL (brechas: $800 \pm 27 \mu\text{m}$), aumento de 10X para microfotografías y análisis con ImageJ (software, NIH) para determinar la migración celular.

Discusión: La literatura reporta que el DMSO en concentraciones menores de 0.5% mantiene la viabilidad celular sin efectos citotóxicos¹. En este estudio, la estandarización experimental según las características de la línea celular empleada permitirá generar datos reproducibles sobre la dinámica de cierre de heridas in-vitro².

Conclusiones: Se estandarizaron las condiciones experimentales para evaluar reproduciblemente el potencial cicatrizante el extracto de hojas de *B. simaruba* en modelos in-vitro.

Referencias:

1. Balko, S., Kerr, E., Buchel, E., Logsetty, S., & Raouf, A. (2023). A Robust and Standardized Approach to Quantify Wound Closure Using the Scratch Assay. *Methods Protoc.* 2023, 6, 87.
2. Piras, F., Sogos, V., Pollastro, F., Appendino, G., & Rosa, A. Arzanol, a natural phloroglucinol α -pyrone, protects HaCaT keratinocytes against H_2O_2 -induced oxidative stress, counteracting cytotoxicity, reactive oxygen species generation, apoptosis, and mitochondrial depolarization. *J Appl Toxicol.* 2024; 44:720–732.