

Informe de Actividades del Periodo Sabático

Dr. Felipe Aparicio Platas

16 de junio de 2023

Con fundamento en el Artículo 231 del RIPPPA de la Universidad Autónoma Metropolitana, una vez que ha concluido el año sabático que solicité del **21 de febrero de 2022 al 20 de febrero de 2023**, presento el siguiente informe.

I. Actividades en materia de docencia

Considerando la importancia que tiene la actividad docente en nuestra Universidad, y en particular en nuestra División, durante el año sabático participé en actividades de **actualización y fortalecimiento de mi formación docente**, para lo cual realicé las siguientes actividades:

1. Participé en el evento titulado **Turnitin Summit Americas 2022**.

Este evento virtual de tres días de octubre del 2022 tuvo como objetivo proponer estrategias para avanzar en la transformación digital de la educación mediante la innovación en las prácticas pedagógicas.

Participé en conversaciones con líderes educativos, mesas redondas con educadores de la región y sesiones diseñadas para ayudar y apoyar a los estudiantes a crear trabajos originales.

En particular, participé en este evento porque estoy interesado en promover e impulsar la calidad de las actividades docentes y de investigación científica en el Departamento de Ciencias Naturales y en la División de Ciencias Naturales e Ingeniería.

2. Terminé la escritura del libro de **Química I** y lo sometí para su publicación ante el Consejo Editorial de la División de Ciencias Naturales e Ingeniería (CE-DCNI).

Este libro cubre los temas del curso de Química I de dos programas de licenciatura en nuestra División: Biología Molecular e Ingeniería Biológica. El libro cuenta con más de 60 problemas resueltos con detalle a lo largo de los capítulos y más de 550 problemas propuestos y con su respuesta al final del libro.

Este libro lo escribí en colaboración con el Dr. Arturo Abreu. Es importante señalar que el CE-DCNI dictaminó favorablemente esta obra, con cambios mayores. Actualmente estamos incorporando las correcciones sugeridas por los revisores. La nueva versión estará lista en los tiempos que nos estableció la CE-DCNI. Esperamos que el libro sea publicado este año.

II. Actividades en materia de investigación

Durante el año sabático **fortalecí las siguientes líneas de investigación:**

L1. **Biología Cuántica:** Estudios teóricos y computacionales de los fenómenos de coherencia y entrelazamiento cuánticos en sistemas biomoleculares.

L2. Reactividad Química de Biomoléculas: Estudios teóricos y computacionales de las propiedades reactivas de canales iónicos y proteínas bloqueadoras de canales.

L3. Estabilidad de Biomoléculas: Estudios teóricos y computacionales de las propiedades estructurales y de estabilidad térmica de biomoléculas.

Es importante señalar que estas son algunas de las líneas de investigación que he desarrollado en los últimos años en la UAM, las cuales están inscritas en el marco de las líneas de generación y aplicación del conocimiento del Cuerpo Académico de Fisicoquímica y Diseño Molecular, al cual pertenezco.

A continuación presento las actividades y productos de trabajo que realicé, señalando entre paréntesis la línea de investigación a la que pertenece cada producto:

1. Envié el siguiente artículo para su publicación:

A. **Towards understanding the thermal stability of proteins: a molecular dynamics study of mesophilic, thermophilic and mutant ribosomal protein L30** (2023), Alejandro León-Ramírez, Salomón de Jesús Alas-Guardado, Gerardo Pérez-Hernández, Felipe Aparicio. *Journal of Molecular Graphics and Modelling*, sometido. (L3).

2. Publiqué las siguientes memorias de congreso:

A. H. E. Rangel-Hernández and F. Aparicio. **Theoretical Study on the Structural Properties of a Cryptochrome Molecule.** *Proceedings of the 8th Regional Biophysics Conference 2022.* 8(1), 28 - 33, 2022. (L1).

B. P. Delarue and F. Aparicio. **Structural Fluctuations of a Single Amino-Acid: A Theoretical Study of the Spectroscopic Properties.** *Proceedings of the 8th Regional Biophysics Conference 2022.* 8(1), 48 - 57, 2022. (L2).

C. F. Aparicio. **Dynamical Properties of a Family of Thioredoxins: A Molecular Dynamics Study.** *Proceedings of the 8th Regional Biophysics Conference 2022.* 8(1), 89 - 95, 2022. (L3).

3. Participé en los siguientes congresos nacionales e internacionales:

A. **Virtual Winter School on Computational Chemistry 2023. February 6 - 10, 2023.** Evento virtual en el que presenté un cartel.

■ Cartel: *Multi-task Deep Neural Network for Curcumin - Potassium Channel Interaction.* (L1).

B. **8th ORCA Users Meeting, December 6 - 7, 2022, Max-Planck-Institut für Kohlenforschung, Mülheim an der Ruhr, Germany.** Evento virtual en el que participé impartiendo una conferencia.

■ Conferencia: *Theoretical Study of the Photosynthetic Complex LH2.* (L1).

C. **XX Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica, celebrada del 17 al 19 de noviembre de 2022 en Cuernavaca, Morelos, México.** Evento presencial en el que participé como autor y coautor de 2 trabajos.

■ Cartel: *Predicción de las propiedades electrónicas de pigmentos usando redes neuronales.* (L2)

■ Cartel: *Estudio de las propiedades electrónicas de los pigmentos del complejo fotosintético LH2.* (L1)

- D. **8th Regional Biophysics Conference 2022. “Physique Appliquée à la Biologie”, August 22 - 26, 2022, Université de Bourgogne, Dijon, France.** Evento virtual en el que participé como autor y coautor de 3 trabajos.
- Conferencia: *Dynamical Properties of a Family of Thioredoxins: A Molecular Dynamics Study.* (L3).
 - Cartel: *Theoretical Study on the Structural Properties of a Cryptochrome Molecule.* (L1).
 - Cartel: *Structural Fluctuations of a Single Amino-Acid: A Theoretical Study of the Spectroscopic Properties.* (L2).
4. Dirigí 3 proyectos de servicio social.
- A. Título del proyecto: **Estudio teórico de las propiedades estructurales de un canal de potasio del tipo Kv1.2 y su interacción con la curcumina.** (L2).
 Nombre del alumno: Joel Antonio Escobar García.
 Periodo: 1 de marzo de 2022 al 31 de agosto de 2022.
 Estatus: concluido.
- B. Título del proyecto: **Estudios teóricos de las propiedades dinámicas y reactivas de una canal de potasio del tipo KcsA y su interacción con curcumina.** (L2).
 Nombre del alumno: Claudia Idalid Malerva Trejo.
 Periodo: 1 de diciembre de 2022 al 31 de mayo de 2023.
 Estatus: en proceso. Debido al paro estudiantil, este proyecto se retrasó un mes.
- C. Título del proyecto: **Estudios teóricos de las propiedades dinámicas y electrónicas del complejo fotosintético LH2.** (L1).
 Nombre del alumno: Adrián de Jesús Santiago Rivera.
 Periodo: 9 de enero de 2023 al 10 de julio de 2023.
 Estatus: en proceso. Debido al paro estudiantil, este proyecto se retrasó un mes.
5. Participé en el comité tutorial del alumnos Edgar López Pérez, quien actualmente cursa el nivel Doctorado en el Programa de Posgrado en Ciencias Naturales e Ingeniería.
6. Durante el periodo sabático inicié colaboraciones con los siguientes profesores.
- A. Dr. Roberto Bernal Jaquez. Departamento de Matemáticas y Sistemas. División de Ciencias Naturales e Ingeniería. Universidad Autónoma Metropolitana, Unidad Cuajimalpa.
La colaboración consiste en desarrollar y aplicar técnicas de inteligencia artificial (machine learning) en el diseño de moléculas con propiedades farmacológicas de interés.
- B. Dra. Laura Escobar Pérez. Departamento de Fisiología. Facultad de Medicina. Universidad Nacional Autónoma de México.
La colaboración consiste en estudiar la interacción de la curcumina con canales iónicos.
- C. Dr. Marcelo Galván Espinosa. Área de Fisicoquímica Teórica. Departamento de Química. División de Ciencias Básicas e Ingeniería. Universidad Autónoma Metropolitana, Unidad Iztapalapa.

La colaboración consiste en estudiar, con métodos basados en la mecánica cuántica, los procesos de transferencia de iones K^+ a través de los canales iónicos, así como las propiedades de selectividad y especificidad de dichos canales.

D. Dr. Patrice Delarue. Laboratoire Interdisciplinaire Carnot de Bourgogne, UMR 5209 CNRS-Université de Bourgogne, France.

La colaboración consiste en estudiar las propiedades espectroscópicas de biomoléculas.

7. En el plan de trabajo que presenté con mi solicitud de año sabático, me propuse realizar estancias cortas de investigación en el grupo de Química Teórica del Departamento de Química del CINVESTAV y en el Área de Fisicoquímica Teórica del Departamento de Química de la UAM Iztapalapa.

Debo informar que mantengo contacto con colegas de estos departamentos académicos, sin embargo, debido a la pandemia por COVID-19, no fue posible concretar las estancias cortas de investigación, sólo participé en algunos seminarios y en actividades de divulgación científica en el Departamento de Química de la UAM Iztapalapa.

III. Actividades en materia de divulgación

Considerando que la preservación y difusión de la cultura, así como la divulgación de la ciencia, son funciones sustantivas que como académico de la UAM debo realizar, en este año sabático hice las siguientes actividades:

1. **Participé en el diseño, edición y grabación del podcast de divulgación de la ciencia** del Departamento de Química de Universidad Autónoma Metropolitana, Unidad Iztapalapa, de enero a julio de 2022.