

**Fecha de presentación del informe:** 28 de octubre de 2024  
**Sesión del Consejo Divisional (aprobación):** CUA-DCNI-179-19  
**Clave del proyecto:** 76S179-19

1. **Título del proyecto:** Estudio de la estabilidad térmica de proteínas utilizando técnicas computacionales

2. **Informe:** Final

Fecha de inicio: 9/10/2019

Fecha de termino: 8/10/2024

Oficio de prórroga: DCNI.CD.092.24

3. **Responsable y participantes del proyecto:**

Dr. Salomón de Jesús Alas Guardado (Responsable)

Dr. Felipe Aparicio Platas

Dr. Gerardo Pérez Hernández

4. **Resumen**

Durante este proyecto de investigación estuvieron involucrados 7 alumnos y 6 alumnas de la Licenciatura en Biología Molecular y 1 alumno de Posgrado Divisional de CNI. El alumnado a nivel licenciatura ha estado involucrado en la realización de proyectos terminales y servicios sociales, participando en el análisis de diferentes proteínas nativas y mutantes procedentes de organismos mesófilos, termófilos e hipertermófilos. Mientras que, el alumno de doctorado estuvo realizando investigaciones detalladas de la estructura de la subunidad  $\beta$  de la ATP sintasa procedente del organismo termófilo *PS3*. A continuación se enumeran los hechos más importantes de esta investigación:

- a) En todos los casos se realizó la revisión bibliográfica de las proteínas a estudiar.
- b) En el proyecto se han analizado en total 24 sistemas proteicos: 7 monómeros termófilos nativos, 3 homodímeros termófilos nativos, 1 homodímero mesófilo nativo, 3 monómeros mesófilos nativos, 8 monómeros termófilos mutantes, 1 monómero mesófilo mutante y 1 monómero termófilo nativo con ligando. Además, 4 de estos sistemas son pares de proteínas homólogas termófila-mesófila.
- c) Para los 4 pares homólogos se han obtenido las curvas de estabilidad térmica y para 3 proteínas termófilas nativas se han obtenido también estas curvas, es decir, se realizaron 11 curvas en total.
- d) Todas las estructuras de las proteínas se han analizado utilizando herramientas bioinformáticas: VMD, PyMol, ESPript, BLAST, etc.
- e) Los tiempos de simulación para casi todos los sistemas han sido de 1  $\mu$ s.
- f) Se trabajaron diferentes temperaturas para alcanzar los objetivos propuestos.
- g) Todos los experimentos se realizaron en los servidores computacionales que se tienen en el Laboratorio de Fisicoquímica y Simulación Molecular del Departamento de Ciencias Naturales.

Cabe señalar que, antes de iniciar este proyecto se tenía el estudio de 2 pares de proteínas homólogas. Por tanto, ahora se cuenta con 6 pares de proteínas homólogas. Eso ha permitido sobrepasar la propuesta original del proyecto de analizar 4 proteínas homólogas.

Por otra parte, se han hecho actividades no contempladas originalmente en el proyecto, como son: a) análisis del efecto de la carga en la proteína histidina fosfotransportadora HPr, b) análisis de mutaciones en las proteínas MGMT, HPr y CheY, c) análisis de las estructuras de los homodímeros rHMfA, rHMfB y Arc represor, d) Análisis de la subunidad  $\beta$  aislada del complejo ATP sintasa y d) análisis de plegamiento. Los análisis de las mutaciones han contribuido a conocer el efecto que tienen las interacciones moleculares sobre la estabilidad térmica de las proteínas, en particular, en la formación de los puentes salinos. Mientras que, el análisis de la carga ha contribuido a conocer los estados abierto y cerrado de la proteína HPr.

Finalmente, el grupo de trabajo ha contribuido en: 1) formación de recursos humanos con la co-dirección de alumnos, 2) revisión y escritura de trabajos y artículos y 3) consolidar el Laboratorio de Físicoquímica y Simulación Molecular en el departamento.

La tabla siguiente muestra un resumen acerca de los sistemas analizados, el alumnado involucrado y el tipo de proyecto.

Proteína	Alumno/a	PDB-id <sup>†</sup>	Actividad (Nivel)	Estado	Variante
Arc Rep.	Camila Velasco B.	1ARQ (m)	Servicio Social	En proceso*	Nativa (Dímero)
Ssh10b	Karla P. Juárez L.	1Y9X (t)	Servicio Social	Concluido	Nativa (Dímero)
	Camila Velasco B.		Proyecto Terminal	Concluido	Nativa (Análisis PS)
CheY	Melisa S. Anzures M.	3CHY (m)	Proyecto Terminal	Concluido	Nativa
	José Y. Sol F.	1TMY (t)	Proyecto Terminal		
		Servicio Social	Concluido	Mutante (3) <sup>#</sup>	
rHMfA	Miguel. A. Ponce T.	1B67 (t)	Servicio Social	Concluido	Nativa (Monómero)
	Juan J. J. Gómez C.		Proyecto Terminal	Concluido	Nativa (Dímero)
			Servicio Social	En proceso*	Nativa (Dímero)
rHMfB	Misael Sánchez M.	1A7W (t)	Proyecto Terminal	Concluido	Nativa (Monómero)
	Karen G. Jiménez R.		Servicio Social	En proceso*	Nativa (Dímero)
HPr	Ana K. Flores G.	2HPR (m)	Servicio Social	Concluido	Nativa
	Aranza C. Martínez Z.		Proyecto Terminal		Mutante (1)
	Ana K. Flores G.	1Y4Y (t)	Servicio Social		Nativa
	Aranza C. Martínez Z.				Mutante (1)
MGMT	Oliver A. Sotelo S.	1MGT (t)	Proyecto Terminal	Concluido	Mutante (2)
			Servicio Social	Concluido	Mutante (2)
RNH	Jesús N. Ramírez T.	1JXB (t)	Servicio Social	Concluido	Nativa
		1RIL (m)			Nativa
T $\beta$	Jorge E. Salinas L.	1SKY (t)	Servicio Social	Concluido	Nativa+Ligando
	Edgar López P.		Doctorado	Concluido	Nativa

<sup>†</sup> Código de la proteína en la base de datos de proteínas

<sup>#</sup> el número de mutantes se indica con paréntesis

\* Los reportes están en revisión

m = mesófila

t = termófila

## 5. Grado de avance (GA):

Objetivos	GA (%)	Productos	GA (%)
Seleccionar diferentes proteínas procedentes de organismo termófilos y sus homólogas procedentes de organismos mesófilos	100	Formación de cuatro alumnos de licenciatura, un alumno de maestría y un alumno de doctorado	90
Realizar las curvas de estabilidad térmica de las proteínas seleccionadas	100	Publicación de un artículo de investigación por año en revistas que cuenten con arbitraje internacional	100
Analizar las estructuras primarias y secundarias de las proteínas seleccionadas utilizando herramientas bioinformáticas	100	Publicación de un artículo de divulgación por alumno de posgrado en revistas que cuenten con arbitraje	80*
Analizar factores estructurales de las proteínas seleccionadas utilizando dinámica molecular clásica	100	Asistencia y participación de los alumnos de licenciatura a un congreso nacional	100
		Asistencia y participación de cada alumno de posgrado a congresos nacionales e internacionales	100

\* Actualmente, se sigue elaborando el artículo de divulgación.

## 6. Formación de recursos humanos:

### a) Dirección de tesis de Doctorado (1)

Alumno M. en C. Edgar López Pérez  
 Proyecto *Estudio de la contribución polar, no polar y electrostática a la estabilidad estructural de la subunidad  $\beta$  de la ATP-sintasa mediante simulaciones computacionales*  
 Grado 20 de septiembre de 2024

### b) Proyectos Terminales (7)

- 1) Alumna Camila Velasco Becerril  
 Proyecto *Análisis de puentes salinos en la proteína hipertermófila Ssh10b de Sulfolobus shibatae mediante simulaciones de dinámica molecular*  
 Periodo 15/jul/2024 – 27/sep/2024
- 2) Alumno Juan José de Jesús Gómez Castro  
 Proyecto *Estudio de la estabilidad térmica del homodímero de la histona rHMfA de la arquea termófila Methanothermus fervidus por dinámica molecular*  
 Periodo 11/jul/2022 – 23/jun/2023

- 3) Alumna Aranza Citlali Martínez Zacarías  
 Proyecto *Estudio de la estabilidad térmica de la proteína histidina fosfotransportadora (BsHPr) de la bacteria mesófila Bacillus subtilis por dinámica molecular*  
 Periodo 8/nov/2021 – 26/may/2022
- 4) Alumno Misael Sánchez Morales  
 Proyecto *Estudio de la estabilidad térmica de la proteína histona rHMfB de la arquea termófila Methanothermus fervidus por dinámica molecular*  
 Periodo 8/nov/2021 – 26/may/2022
- 5) Alumna Melisa Sujey Anzures Mendoza  
 Proyecto *Estudio de la estabilidad térmica de la proteína CheY de la bacteria mesófila Escherichia coli por dinámica molecular*  
 Periodo 8/nov/2021 – 26/may/2022
- 6) Alumno José Yari Sol Fragoso  
 Proyecto *Estudio de la estabilidad térmica de la proteína CheY de la bacteria hipertermófila Thermotoga maritima por dinámica molecular*  
 Periodo 8/nov/2021 – 26/may/2022
- 7) Alumno Oliver Arturo Sotelo Serrano  
 Proyecto *Estudio de la estabilidad térmica de la proteína Tk-MGMT de la arquea termófila Thermococcus kodakaraensis por dinámica molecular*  
 Periodo 11/may/2020 – 23/nov/2020

c) Proyectos de Servicio Social (11)

Proyecto genérico: *Estudios teóricos y experimentales de moléculas con actividad en sistemas biológicos*

- 1) Alumna Camila Velasco Becerril  
 Proyecto\* *Estudio de la estabilidad térmica del dímero de la proteína Arc repressor del bacteriófago P22 por dinámica molecular*  
 Periodo 01/feb/2024 – 31/jul/2024
- 2) Alumna Karen Guadalupe Jimenez Ramírez  
 Proyecto\* *Estudio de la estabilidad térmica del homodímero de la histona rHMfB de la arquea hipertermófila Methanothermus fervidus por dinámica molecular*  
 Periodo 01/oct/2023 – 31/mar/2024
- 3) Alumna Karla Paola Juárez Pérez  
 Proyecto *Estudio de la estabilidad térmica del dímero de la proteína Ssh10b de la arquea hipertermófila Sulfolobus shibatae por dinámica molecular*  
 Periodo 01/oct/2023 – 31/mar/2024
- 4) Alumno Juan José de Jesús Gómez Castro  
 Proyecto\* *Estudio de la estabilidad térmica del homodímero de la histona rHMfA de la arquea hipertermófila Methanothermus fervidus por dinámica molecular*  
 Periodo 01/jul/2023 – 31/dic/2023

- 5) Alumno José Yari Sol Fragoso  
 Proyecto *Estudio del efecto de puentes salinos en la estabilidad térmica de la proteína CheY de la bacteria hipertermófila Thermotoga maritima por dinámica molecular*  
 Periodo 27/jul/2022 – 26/ene/2023
- 6) Alumna Aranza Citlali Martínez Zacarias  
 Proyecto *Estudio del efecto de puentes salinos en la estabilidad térmica de la proteína HPr de la bacteria termófila Bacillus staerothermophilus por dinámica molecular*  
 Periodo 01/nov/2021 – 30/abr/2022
- 7) Alumno Miguel Ángel Ponce Torres  
 Proyecto *Estudio de la estabilidad térmica de la proteína histona rHMfA de la arquea termófila Methanothermus fervidus por dinámica molecular*  
 Periodo 01/nov/2021 – 30/abr/2022
- 8) Alumna Ana Karen Flores Gómez  
 Proyecto *Estudio de la estabilidad térmica de la proteína histidina fosfotransportadora de la bacteria termófila Bacillus stearothermophilus por dinámica molecular*  
 Periodo 01/jul/2020 – 31/dic/2020
- 9) Alumno Oliver Arturo Sotelo Serrano  
 Proyecto *Estudio de la estabilidad térmica de la proteína Pk-MGMT de la arquea termófila Pirococcus kodakaraensis por dinámica molecular*  
 Periodo 01/abr/2020 – 31/oct/2020
- 10) Alumno Jesús Nestor Torres Ramírez  
 Proyecto *Estudio de la estabilidad térmica de la proteína RNAsa H de la bacteria termófila Thermus thermophilus por dinámica molecular*  
 Periodo 15/ene/2020 – 14/jul/2020
- 11) Alumno Jorge Emiliano Salinas López  
 Proyecto *Estudio de la termoestabilidad de la subunidad  $\beta$  de la ATPasa de la bacteria termófila Bacillus PS3*  
 Periodo 15/ene/2020 – 14/jul/2020

\* Los informes escritos están en revisión

## 7. Lista de publicaciones (10)

### a) Publicaciones en revistas internacionales indizadas (6)

- 1) A. C. Martínez-Zacarias, E. López-Pérez, **S. J. Alas-Guardado\***. *Effect of the Lys62Ala mutation on the thermal stability of BstHPr protein by molecular dynamics*. Int. J. Mol. Sci. **25** (12), 6316 (2024).  
 DOI: 10.3390/ijms25126316

- 2) Edgar López-Pérez, Marietta Tuena de Gómez-Puyou, Concepción José Nuñez, Denise Martínez Zapién, Salomón Alas Guardado, Hiram Isaac Beltrán, Gerardo Pérez-Hernández. *Ordered-domain unfolding of thermophilic isolated  $\beta$  subunit ATP synthase*. Prot. Sci. **32** (7), e4689 (2023).  
DOI: 10.1002/pro.4689
  - 3) Ana K. Gómez-Flores, Edgar López-Pérez, Salomón J. Alas-Guardado. *Molecular Dynamics Simulations of HPr Proteins from a Thermophilic and a Mesophilic Organism: A Comparative Thermal Study*. Int. J. Mol. Sci. **24** (11), 9557 (2023).  
DOI: 10.3390/ijms24119557
  - 4) Hiram Isaac Beltrán, Salomón J. Alas-Guardado, Pedro Pablo González-Pérez. *Improving coarse-grained models of protein folding through weighting of polar-polar/hydrophobic-hydrophobic interactions into crowded spaces*. J. Mol. Model. **28**, 87 (2022).  
DOI: 10.1007/s00894-022-05071-5
  - 5) Salomón J. Alas-Guardado, Pedro Pablo González-Pérez, Hiram Isaac Beltrán. *Contributions of topological polar-polar contacts to achieve better folding stability of 2D/3D HP lattice proteins: An in silico approach*. AIMS Biophysics. **8** (3), 291–306 (2021).  
DOI: 10.3934/biophy.2021023
  - 6) Erick López-Chávez, Gerardo Pérez-Hernández, Felipe Aparicio, Salomón J. Alas. *On the Thermal Stability of O6-Methylguanine-DNA Methyltransferase from Archaeon Pyrococcus kodakaraensis by Molecular Dynamics Simulations*. J. Chem. Inf. Model. **60**, 2138–2154 (2020).  
DOI: 10.1021/acs.jcim.0c00012
- b) Memorias arbitradas de congreso (4)
1. Juan José de Jesús Gómez Castro, Salomón J. Alas Guardado. *Estudio de la termoestabilidad del homodímero de la histona rHMfA de la arquea termófila Methanothermus fervidus por dinámica molecular*. Congreso Internacional de la Sociedad Química de México 2023. Memoria de congreso aceptada, Diciembre 2023.
  2. Edgar López, Gerardo Pérez, Salomón J. Alas. *Muestreo del espacio conformacional del péptido PP-50 por simulación computacional*. Congreso Internacional de la Sociedad Química de México 2023. Memoria de congreso aceptada, Diciembre 2023.
  3. Salomón J. Alas Guardado, Ana K. Gómez Flores, Edgar López Pérez. *Cálculo del  $\Delta C_p$  de las Proteínas Homólogas BstHPr y BsHPr por Dinámica Molecular*. Congreso Internacional de la Sociedad Química de México 2023. Memoria de congreso aceptada, Diciembre 2023.
  4. Edgar López Pérez, Gerardo Pérez Hernández, Salomón de Jesús Alas Guardado. *Importancia de las interacciones electrostáticas en el loop DELSEED en un péptido proveniente de la subunidad  $\beta$  de la ATP sintasa*. Revista Tendencias en Docencia e Investigación en Química. Memoria de congreso aceptada, Diciembre 2023.

## 8. Lista de presentaciones en congresos (28)

### a) Congresos internacionales (8)

#### Congreso 1: LatinXChem 2023 (16 and 17 october / 2023)

- 1) Trabajo: Sampling the conformational space of PP-50 peptide by computational simulation.  
Autores: **Edgar López Pérez**, Salomón J. Alas Guardado, Gerardo Pérez Hernández.
- 2) Trabajo: Study of the thermal stability of rHMfA protein by molecular dynamics.  
Autores: **Juan José de Jesús Gómez Castro**, Salomón J. Alas Guardado.
- 3) Trabajo: Study of the thermal stability of *Bst*HPr protein by molecular dynamics.  
Autores: Salomón J. Alas Guardado, Ana K. Gómez Flores, Edgar López Pérez.

#### Congreso 2: Congreso Internacional de la Sociedad Química de México 2023 (2–6 octubre / 2023)

- 4) Trabajo: Muestreo del espacio conformacional del péptido PP-50 por simulación computacional.  
Autores: **Edgar López**, Gerardo Pérez, Salomón J. Alas.
- 5) Trabajo: Estudio de la termoestabilidad del homodímero de la histona rHMfA de la arquea termófila *Methanothermus fervidus* por dinámica molecular.  
Autores: **Juan José de Jesús Gómez Castro**, Salomón J. Alas Guardado.
- 6) Trabajo: Cálculo del  $\Delta C_p$  de las proteínas homólogas *Bst*HPr y *Bs*HPr por dinámica molecular:  
Autores: Salomón J. Alas Guardado, Ana K. Gómez Flores, Edgar López Pérez.

#### Congreso 3: XIV Congreso Internacional de Docencia e Investigación en Química (5–7 julio / 2023)

- 7) Trabajo: Importancia de las interacciones electrostáticas en el loop DELSEED en un péptido proveniente de la subunidad  $\beta$  de la ATP sintasa.  
Autores: **Edgar López**, Gerardo Pérez, Salomón J. Alas.

#### Congreso 4: LatinXChem 2022 (28 november / 2022)

- 8) Trabajo: *Exploring the thermal stability of hyperthermophilic MGMT protein by molecular dynamics.*  
Autores: Salomón de Jesús Alas Guardado, Erick López Chávez

### b) Congresos nacionales (17)

#### Congreso 1: XXI Reunión Mexicana de Físicoquímica Teórica (9–11 noviembre / 2023)

- 1) Trabajo: Predicción de la capacidad calorífica intrínseca de proteínas por dinámica molecular.  
Autores: **Edgar López Pérez**, Gerardo Pérez Hernández, Salomón J. Alas Guardado.
- 2) Trabajo: Termoestabilidad de la histona rHMfA por dinámica molecular:  
Autores: **Juan José de Jesús Gómez Castro**, Salomón J. Alas Guardado.
- 3) Trabajo: Estudio de la estabilidad térmica de la proteína *Bst*HPr por dinámica molecular.  
Autores: Salomón J. Alas Guardado, Ana K. Gómez Flores, Edgar López Pérez.

#### Congreso 2: VIII Congreso de Físicoquímica, Estructura y Diseño de Proteínas (5–7 noviembre/2023)

- 4) Trabajo: Estudio de la estabilidad térmica de la subunidad  $\beta$  de la ATP sintasa.  
Autores: **Edgar López Pérez**, Salomón J. Alas Guardado, Gerardo Pérez Hernández.
- 5) Trabajo: Análisis de mecanismos moleculares de la termoestabilidad de la histona rHMfA por dinámica molecular.  
Autores: **Juan José de Jesús Gómez Castro**, Salomón J. Alas Guardado.

- 6) Trabajo: Estudio de la estabilidad térmica de la proteína HPr del organismo termófilo *B. stearothermophilus* por dinámica molecular.  
Autores: Salomón J. Alas Guardado, Ana K. Gómez Flores, Edgar López Pérez.

Congreso 3: XX Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica (17–19 noviembre / 2022)

- 7) Trabajo: Estudio de la estabilidad térmica de proteínas termófilas por dinámica molecular.  
Autores: Salomón de Jesús Alas Guardado.  
8) Trabajo: Explorando los cambios conformacionales dependientes del pH en la subunidad  $\beta$  de la ATP-sintasa.  
Autores: **Edgar López**, Felipe Aparicio, Hiram Beltrán, Gerardo Pérez, Salomón Alas.

Congreso 4: BioPhys Mex 2022 (10 y 11 noviembre / 2022)

- 9) Trabajo: Explorando cambios conformacionales dependientes de pH en la subunidad  $\beta$  de la ATP-sintasa.  
Autor: **Edgar López Pérez**.

Congreso 5: XXXIII Congreso Nacional de Bioquímica (17–21 octubre / 2022)

- 10) Trabajo: Exploring the thermal stability of thermophilic proteins by molecular dynamics.  
Autor: Salomón de Jesús Alas Guardado.  
11) Trabajo: Exploring the unfolding free energy landscape of the thermophilic  $\beta$ -ATPase subunit by molecular dynamics simulations.  
Autores: **Edgar López**, Felipe Aparicio, Hiram Beltrán, Gerardo Pérez, Salomón Alas.

Congreso 6: XIX Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica (18 y 19 noviembre / 2021)

- 12) Trabajo: Estudio de la termoestabilidad de la proteína *BstHPr* por dinámica molecular.  
Autores: **Ana K. Gómez Flores**, Edgar López Pérez, Salomón J. Alas Guardado.  
13) Trabajo: Identificando regiones de bisagra en la subunidad  $\beta$  de la ATP sintasa.  
Autores: **Edgar López**, Gerardo Pérez, Salomón Alas, Felipe Aparicio.

Congreso 7: XII Congreso de la rama de Bioenergética y Membranas (17–21 octubre / 2021)

- 14) Trabajo: Importance of DELSEED loop electrostatic interactions in a peptide based on the thermophilic F1-ATPase  $\beta$  subunit.  
Autores: **Edgar López**, Gerardo Pérez, Salomón Alas, Felipe Aparicio.

Congreso 8: IV Coloquio de Simulaciones Computacionales (23–27 agosto / 2021)

- 15) Trabajo: Estudios de la estabilidad térmica de la subunidad  $\beta$  aislada del *Bacillus PS3* por dinámica molecular.  
Autores: **Edgar López Pérez**.

Congreso 9: XVIII Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica (24–26 octubre / 2019)

- 16) Trabajo: Estudio de la de la contribución electrostática a la estabilidad de la subunidad  $\beta$   
Autores: **Edgar López**, Gerardo Pérez, Salomón Alas, Felipe Aparicio.

Congreso 10: 11th Meeting on Molecular Simulations: From simple fluids to chemical reactions (14–16 noviembre / 2022)

- 17) Trabajo: Studies of the thermal stability of F1-ATPase isolated T $\beta$  subunit from *Bacillus PS3* by molecular dynamics.

Autores: **Edgar López**, Gerardo Pérez, Salomón Alas, Felipe Aparicio.

c) Congresos locales (3)

Congreso 1: 8o Simposio de la Licenciatura en Biología Molecular (28–30 agosto / 2024)

- 1) Trabajo: Estudio de la estabilidad térmica de proteínas por dinámica molecular  
 Autores: Salomón de Jesús Alas Guardado, Ana K. Gómez F., Gómez F., Aranza C. Martínez Z., Edgar López P.

Congreso 2: 7o Simposio de Biología Molecular (12–14 septiembre / 2022)

- 2) Trabajo: Análisis de estabilidad térmica de la proteína CheY proveniente del organismo mesófilo *Escherichia coli* por dinámica molecular.  
 Autores: **Melisa Sujey Anzures Mendoza**.

Congreso 3: 4o Simposio de las Licenciaturas de la DCNI (23 y 24 septiembre / 2021)

- 3) Trabajo: Estudio de la termoestabilidad de la proteína *BstHPr* por dinámica molecular.  
 Autores: **Ana Karen Gómez Flores**.

Nota: Los nombres de los alumnos y las alumnas que presentaron los trabajos están con letras resaltadas en color negro.

9. **Tabla comparativa entre lo establecido en el calendario de actividades y lo alcanzado hasta la entrega del informe anual (incluir únicamente cantidades).**

Producto entregable	Planeado para el periodo de evaluación	Reportado en el periodo
<b>Formación de recursos humanos nivel licenciatura</b>		
Servicio Social	0	11
Proyecto terminal	4	7
Tesis de licenciatura	0	0
<b>Formación de recursos humanos nivel posgrado</b>		
Especialización	0	0
Maestría	1	0
Doctorado	1	1
<b>Publicaciones</b>		
Artículos	4	6
Capítulos de libro	0	0
Memorias o Proceedings	0	4
<b>Difusión o Divulgación</b>		
Congresos	4	17
Conferencias	0	2
<b>Otros: Especificar y proveer detalle del producto</b>		
a) Impartición de seminarios y talleres		
1) Seminario: Explorando la funcionalidad de las proteínas, Colegio de Bachilleres No. 7, 18 de junio de 2024. Salomón de Jesús Alas Guardado.		

- 2) Seminario: Explorando la estabilidad térmica de proteínas termófilas por dinámica molecular. UAM Cuajimalpa, División de Ciencias Naturales e Ingeniería, abr 2021.
  - 3) Taller: “Introducción a la estabilidad de proteínas” al alumnado de la DCNI, del 20 de abril al 7 de mayo de 2020, duración 20 horas. Salomón de Jesús Alas Guardado.
- b) Premios que se han obtenido por la investigación en el proyecto
- 1) Alumna: Ana Karen Gómez Flores  
Premio: Primer lugar, presentaciones orales durante el 4o Simposio de las Licenciaturas de la DCNI.  
Trabajo: Estudio de la termoestabilidad de la proteína BstHPr por dinámica molecular.  
Fecha: 24/sep/2021
  - 2) Alumna: Ana Karen Gómez Flores  
Premio: Diploma a la Investigación 2020  
Trabajo: Estudio de la estabilidad térmica de la proteína histidina fosfotransportadora de la bacteria termófila *Bacillus stearotherophilus* por dinámica molecular (Proyecto de Servicio Social).  
Fecha: noviembre de 2021
  - 3) Alumna: Aranza Citlali Martínez Zacarias  
Premio: Diploma a la Investigación 2023  
Trabajo: Estudio del efecto de puentes salinos en la estabilidad térmica de la proteína HPr de la bacteria termófila *Bacillus stearotherophilus* por dinámica molecular (Proyecto de Servicio Social).  
Fecha: octubre de 2024

#### 10. Justificación en caso de existir desviaciones en el proyecto.

No aplica

#### 11. Atención a observaciones al informe anual previo por parte del Consejo Divisional (cuando aplique).

Se atendieron las sugerencias del oficio **DCNI.CD.51.23** (28 de junio de 2023).

- 1) Se señale cuáles alumnos presentaron los trabajos.

**Respuesta:** Los nombres de los alumnos y las alumnas que presentaron los trabajos están con letras resaltadas en color negro.

- 2) Se indique si el proyecto CONACyT aún está vigente.

**Respuesta:** el proyecto de CONAHCYT finalizó el pasado 21 de agosto.

- 3) Se aclare la situación del alumnado de maestría y doctorado. Debido a que en el proyecto inicial se tenía estipulada la titulación de un estudiante de maestría y, esto no se encuentra mencionado en los avances y un estudiante de doctorado. Lo anterior, ya que la incorporación del estudiante de maestría podría haber contribuido a la formación de un segundo producto de investigación.

**Respuesta:** el alumno de doctorado concluyó su investigación. No fue posible la incorporación de alumnos/as de maestría en el proyecto.

Además, se atendieron las sugerencias del oficio **DCNI.CD.092.24** (27 de septiembre

de 2024).

- 1) Proyecto con gran avance respecto a los objetivos planteados. La formación de recursos humanos a nivel licenciatura es excelente; si el grado de doctorado es finalizado en breve, el presente proyecto habrá finalizado satisfactoriamente.

**Respuesta:** el alumno de doctorado concluyó su investigación; el examen de grado se presentó el pasado 24 de septiembre.

- 2) Se solicita incluir la clave del proyecto divisional y se pide considerar que el proyecto concluye en octubre de 2024, para tomar las medidas para el cierre del proyecto, a través de la entrega oportuna del informe final o la renovación de acuerdo a los lineamientos divisionales vigentes.

**Respuesta:** la clave del proyecto ha sido incluida. Se envía el informe final del mismo.

Atentamente



Dr. Salomón de Jesús Alas Guardado  
Responsable del proyecto  
Ciudad de México a 27 de octubre de 2024