



Dr. Rubén Antonio Romo Mancillas

Profesor investigador

SNI Nivel 1 (vigencia 2027)
 Perfil PRODEP (vigencia 2025)

Formación Académica:

Posdoctorado Diseño Computacional de Fármacos, Lansteiner Scientific – UAM-Lerma
 Doctorado en Ciencias Químicas, UNAM
 Maestría en Ciencia Químicas, UNAM
 Químico Farmacéutico Biólogo, FQ-UNAM

Contacto:

ruben.romo@uaq.mx
https://bit.ly/dacsif_uaq

QUÍMICA MEDICINAL

Diseño Asistido por Computadora y Síntesis de Fármacos

Líneas de Investigación

- Síntesis orgánica de compuestos con actividad biológica.
- Búsqueda de nuevas moléculas líder por exploración virtual de bibliotecas de compuestos
- Relaciones cuantitativas estructura-actividad para la optimización de moléculas con actividad biológica
- Modelado molecular de complejos ligando-enzima y ligando-receptor membranal.
- Modelado de mecanismos de reacción enzimáticas y mecanismos de acción de fármacos.

Formación de recursos humanos:

Nivel	En proceso	Terminada
Licenciatura	0	3
Maestría	1	6
Doctorado	4	1



PUBLICACIÓN DE ARTÍCULOS

1. Ignacio-Mejía, I., Contreras-García, I.J., Mendoza-Torreblanca, J. G., Medina-Campos, O. N., Pedraza-Chaverri, P., García-Cruz, M. E., **Romo-Mancillas, A.**, Gómez-Manzo, S., Bandala, C., Sánchez-Mendoza, M. E., Pichardo-Macías, L. A., Cárdenas-Rodríguez, N. Evaluation of the Antioxidant Activity of Levetiracetam in a Temporal Lobe Epilepsy Model. *Biomedicines* (2023) 11(3):848. DOI: [10.3390/biomedicines11030848](https://doi.org/10.3390/biomedicines11030848)
2. Villegas-Ruíz, V., **Romo-Mancillas, A.**, Medina-Vera, I., Castro-López, K. A., Ramirez-Chiquito, J. C., Fonseca-Montaño, M. A., García-Cruz, M. E., Rivera-Luna, R., Mendoza-Torreblanca, J. G., Juárez-Méndez, S. The Proliferating Cell Nuclear Antigen (PCNA) Transcript Variants as Potential Relapse Markers in B-Cell Acute Lymphoblastic Leukemia. *Cells* (2022) 11(20): 3205. DOI: [10.3390/cells11203205](https://doi.org/10.3390/cells11203205)
3. Contreras-García, I. J., Cárdenas-Rodríguez, N., **Romo-Mancillas, A.**, Bandala, C., Zamudio, S. R., Gómez-Manzo, S., Hernández-Ochoa, B., Mendoza-Torreblanca, J. G., Pichardo-Macías, L. A. Levetiracetam Mechanisms of Action: From Molecules to Systems. *Pharmaceuticals* (2022) 15(4): 475. DOI: [10.3390/ph15040475](https://doi.org/10.3390/ph15040475).
4. Huerta-García, C. S., Pérez, D. J., Velázquez-Martínez, C. A., Tabatabaei Dakhili, S. A., **Romo-Mancillas, A.**, Castillo, R., Hernández-Campos, A. Structure–Activity Relationship of N-Phenylthieno[2,3-b]pyridine-2-carboxamide Derivatives Designed as Forkhead Box M1 Inhibitors: The Effect of Electron-Withdrawing and Donating Substituents on the Phenyl Ring *Pharmaceuticals* (2022) 15(3): 283. DOI: [10.3390/ph15030283](https://doi.org/10.3390/ph15030283)
5. Betancourt-Conde I, Avitia-Domínguez C, Hernández-Campos A, Castillo R, Yépez-Mulia L, Oria-Hernández J, Méndez ST, Sierra-Campos E, Valdez-Solana M, Martínez-Caballero S, Hermoso JA, **Romo-Mancillas A**, Téllez-Valencia A. Benzimidazole Derivatives as New and Selective Inhibitors of Arginase from *Leishmania mexicana* with Biological Activity against Promastigotes and Amastigotes. *International Journal of Molecular Sciences*. (2021), 22(24):13613. DOI: [10.3390/ijms222413613](https://doi.org/10.3390/ijms222413613)
6. Valencia-Guzmán, C. J.; Castro-Ruiz, J. E.; García-Gasca, T.; Rojas-Molina, A.; **Romo-Mancillas, A.**; Luna-Vázquez, F. J.; Rojas-Molina, J. I.; Ibarra-Alvarado, C. Endothelial TRP channels and cannabinoid receptors are involved in affinin-induced vasodilation, *Fitoterapia* (2021),153,104985. DOI: [10.1016/j.fitote.2021.104985](https://doi.org/10.1016/j.fitote.2021.104985)
7. Aguilera-Durán, G.; **Romo-Mancillas, A.** Behavior of Chemokine Receptor 6 (CXCR6) in Complex with CXCL16 Soluble form Chemokine by Molecular Dynamic Simulations: General Protein–Ligand Interaction Model and 3D-QSAR Studies of Synthetic Antagonists. *Life* (2021), 11, 346. DOI: [10.3390/life11040346](https://doi.org/10.3390/life11040346)
8. Stefani, T.; **Romo-Mancillas, A.**; Carrizales-Castillo, J.J.J.; Arredondo-Espinoza, E.; Ramírez-Estrada, K.; Alcantar-Rosales, V.M.; González-Maya, L.; Sánchez-Carranza, J.N.; Balderas-



- Renterías, I.; Camacho-Corona, M.d.R. Cytotoxic Fractions from *Hechtia glomerata* Extracts and p-Coumaric Acid as MAPK Inhibitors. *Molecules* (2021), 26, 1096. DOI: [10.3390/molecules26041096](https://doi.org/10.3390/molecules26041096)
9. Nocado-Mena, D., Arrasate, S., Garza-González, E., Rivas-Galindo, V. M., **Romo-Mancillas, A.**, Munteanu, C. R., Sotomayor, N., Lete, E., Barbolla, I., Martín, C. A., Camacho-Corona, M. R. Molecular docking, SAR analysis and biophysical approaches in the study of the antibacterial activity of ceramides isolated from *Cissus incisa*. *Bioorganic Chemistry* (2021), 109, 104745. DOI: [10.1016/j.bioorg.2021.104745](https://doi.org/10.1016/j.bioorg.2021.104745)
 10. Becerra, E.; Aguilera-Durán, G.; Berumen, L.; **Romo-Mancillas, A.**; García-Alcocer, G. Study of Endogen Substrates, Drug Substrates and Inhibitors Binding Conformations on MRP4 and Its Variants by Molecular Docking and Molecular Dynamics. *Molecules* (2021), 26, 1051. DOI: [10.3390/molecules26041051](https://doi.org/10.3390/molecules26041051)
 11. Buitrón-González, I., Aguilera-Durán, G., **Romo-Mancillas, A.** In-silico drug repurposing study: Amprenavir, enalaprilat, and plerixafor, potential drugs for destabilizing the SARS-CoV-2 S-protein-angiotensin-converting enzyme 2 complex. *Results in Chemistry* (2021), 3, 100094. DOI: [10.1016/j.rechem.2020.100094](https://doi.org/10.1016/j.rechem.2020.100094)
 12. Aguilera-Durán, G., **Romo-Mancillas, A.** Computational Study of C-X-C Chemokine Receptor (CXCR)3 Binding with Its Natural Agonists Chemokine (C-X-C Motif) Ligand (CXCL)9, 10 and 11 and with Synthetic Antagonists: Insights of Receptor Activation towards Drug Design for Vitiligo. *Molecules* (2020), 25(19), 4413. DOI: [10.3390/molecules25194413](https://doi.org/10.3390/molecules25194413)
 13. Rodríguez-Cruz, A., **Romo-Mancillas, A.**, Mendiola-Precoma, J., Escobar-Cabrera, J.E., García-Alcocer, G., Berumen, L.C. Effect of valerianic acid on neuroinflammation in a MPTP-induced mouse model of Parkinson's disease. *IBRO Reports*. (2020), 8: 28-35. DOI: [10.1016/j.ibror.2019.12.002](https://doi.org/10.1016/j.ibror.2019.12.002)
 14. D. Medina-Ruiz, B. Erreguin-Luna, F.J. Luna-Vázquez, **A. Romo-Mancillas**, A. Rojas-Molina, C. Ibarra-Alvarado. (2019) Vasodilation elicited by isoxsuprine, identified by high-throughput virtual screening of compound libraries, involves activation of the NO/cGMP and H2S/KATP pathways and blockade of calcium channels. *Molecules* 24(5) E987. doi [10.3390/molecules24050987](https://doi.org/10.3390/molecules24050987)
 15. Gutiérrez-Gutiérrez, F., **Romo-Mancillas, A.**, Puebla-Pérez, A. M., Hernández-Hernández, J. M., Castillo-Romero, A. Identification and molecular characterization of the tubulin-podophyllotoxin-type lignans binding site on *Giardia lamblia*. *Chemical Biology & Drug Design* (2019), 94(6): 2031-2040. DOI: 10.1111/cbdd.13605.
 16. **Romo-Mancillas, A.**, Lemus, R., Pérez-Estrada, R., Kuribreña-Romero de Terreros, F., Domínguez-Ramírez, L. Molecular dynamics simulations of the catalytic subunit of Calpains 1,2,5 and 10: structural analysis with an aim towards drug design *Chemical Biology & Drug Design* (2019), 93(1): 38-49. DOI:10.1111/cbdd.13376.
 17. Castillo-Pazos, D., **Romo-Mancillas, A.**, Barroso-Flores, J. Piperazine-based HIV-1 entry inhibitors: Massive in silico library design and screening for gp120 attachment inhibitors bioRxiv (2018). DOI: [10.1101/330142](https://doi.org/10.1101/330142).
 18. Chávez-Villareal, K.G., García, A., **Romo-Mancillas, A.**, Garza-González, E., Waskman de Torres, N., Miranda, L. D., Moo-Puc, R. E., Chale-Dzul, J., Camacho-Corona, M.R. (2018) Synthesis,



antimycobacterial evaluation and QSAR analysis of meso-dihydroguaiaretic acid derivatives. *Medicinal Chemistry Research* DOI:[10.1007/s00044-017-2125-1](https://doi.org/10.1007/s00044-017-2125-1).

19. Trejo-Soto, P.J., Hernández-Campos, A., **Romo-Mancillas, A.**, Medina-Franco, J.L., Castillo, R. (2018) In search of AKT kinase inhibitors as anticancer agents: structure-based design, docking, and molecular dynamics studies of 2,4,6-trisubstituted pyridines, *Journal of Biomolecular Structure and Dynamics*, 36: 423-442. DOI:[10.1080/07391102.2017.1285724](https://doi.org/10.1080/07391102.2017.1285724)

PUBLICACIÓN DE CAPÍTULOS DE LIBRO

1. Becerra, E.; Aguilera-Durán, G.; Berumen, L.; **Romo-Mancillas, A.**; García-Alcocer, G. 2021. **Computational Approaches: Drug Discovery and Design in Medicinal Chemistry and Bioinformatics**: 2. Study of Endogen Substrates, Drug Substrates and Inhibitors Binding Conformations on MRP4 and Its Variants by Molecular Docking and Molecular Dynamics. Tutone, M. & Almerico, A. M. (Eds.) MDPI Books. Basilea-Suiza. 412 pp. ISBN 978-3-0365-2779-6 (Hbk); ISBN 978-3-0365-2778-9 (PDF). DOI: [10.3390/books978-3-0365-2778-9](https://doi.org/10.3390/books978-3-0365-2778-9)

FORMACIÓN DE RECURSOS HUMANOS

TESIS DIRIGIDAS

LICENCIATURA

ESTUDIANTE	FECHA DE TITULACIÓN	TÍTULO DE TESIS
ACOSTA BUITRÓN IVONNE	19/01/2023	Estudio computacional de variantes del receptor GABAA unido con ligandos selectos para el diseño de nuevos fármacos antiepilépticos.
ECHAVARRÍA PONCE RAMÓN	7/12/2021	Estudio computacional de la interacción de tetrahidrocannabivarina (THCV) con blancos moleculares involucrados en obesidad: receptores a adiponectina y neuropéptido Y
MARTÍNEZ SERRANO DAVID (UAZ)	12/11/2021	Diseño asistido por computadora de nuevos antivirales dirigidos a la zona RBD de la proteína spike (S) del virus SARS-COV-2 (Co-Dirección)

DOCTORADO

EN CIENCIAS QUÍMICO BIOLÓGICAS

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE QUERÉTARO

FACULTAD DE QUÍMICA

Evaluación SNP CONACyT 2022



MAESTRÍA

ESTUDIANTE	FECHA DE TITULACIÓN	TÍTULO DE TESIS
PADILLA ÁLVAREZ MARÍA FERNANDA	EN PROCESO	Modelado molecular y síntesis de compuestos heterocíclicos como activadores alostéricos de la Tirosinasa para el tratamiento de vitiligo
HERNÁNDEZ CASTRO STEPHANIE	31/01/2024	Optimización por modelado molecular y obtención de carboxamidas como posibles inhibidores de la proteína MRP4
RIVERA VARGAS ALEX DANIEL	29/09/2023	Diseño, síntesis y caracterización de moléculas con potencial farmacológico antagonista a los receptores CXCR3 y CXCR6 como tratamiento para vitiligo
HERNÁNDEZ ESTRADA BEATRIZ	11/08/2023	Estudio computacional del canal de calcio dependiente del voltaje de tipo T (CACNA 1G) y su interacción con anticonvulsivos
ALVAREZ BALTAZAR JOSE MANUEL	17/02/2023	Síntesis y evaluación anticonvulsiva en modelos <i>in vitro</i> de pirrolidinas análogas a levetiracetam y brivaracetam
ALEGRIA GONZALEZ CESAR LUIS	24/01/2020	Evaluación <i>in silico</i> de la interacción del cannabidiol con dianas biológicas relacionadas con la epilepsia
AMELIA FABIOLA CHÁVEZ ELÍAS	26/01/2018	Síntesis y actividad antiepiléptica de pirrolidonas 1-4 disustituidas

DOCTORADO

ESTUDIANTE	FECHA DE TITULACIÓN	TÍTULO DE TESIS
LOERA GARCÍA BRENDA VIRGINIA (UASLP)	EN PROCESO	Diseño computacional, síntesis y actividad biológica de benzofuroxanos (Co-Dirección)
AGUILERA DURÁN GIOVANNY	28/07/2021	Estudio computacional de blancos moleculares relevantes en Vitiligo: activación de los receptores CXCR3 y CXCR6, y modulación alostérica de la enzima Tirosinasa



DISTINCIONES

- Sistema Nacional de Investigadores Nivel Candidato 2017-2019, Nivel I 2020-2022. CONACYT. México
- Profesor de tiempo completo con Perfil Deseable PRODEP 2019-2022. SEP. México
- Mención Honorífica en Concurso Nacional de Carteles Estudiantiles por el trabajo titulado "Síntesis y evaluación biológica de derivados de ácido ursólico", cartel presentado en el 54° Congreso Mexicano de Química celebrado en la ciudad de Puebla, Pue. del 29 de septiembre al 3 de octubre de 2019, y cuyos autores son Raymundo Castro Infante, Antonio Romo Mancillas, Giovanni Aguilera Durán, Daniela Ramírez Balderas y Samantha Pacheco Hernández.
- 3er lugar en Concurso de Carteles de Investigación por el trabajo titulado "Acoplamiento molecular y síntesis de ésteres aromáticos del ácido ursólico", cartel presentado en el 7° Congreso Nacional de Ciencias Químico Biológicas celebrado en la ciudad de Zacatecas, Zac. Los días 21 y 22 de octubre de 2019, y cuyos autores son Samantha Pacheco Hernández, Giovanni Aguilera Durán, y Antonio Romo Mancillas.
- 1er lugar Nivel licenciatura por la participación de cartel con título "Análisis computacional de moléculas anticonvulsivas afines a la proteína de vesículas sinápticas 2A (SV2A)" en el 6° Encuentro Anual de Estudiantes: Investigación e Innovación en la DCNE, los días 23-25 de octubre de 2019.
- 1er lugar Nivel Doctorado por la participación de presentación oral con título "Diseño asistido por computadora de moléculas afines a la proteína de vesículas sinápticas 2A (SV2A)" en el 6° Encuentro Anual de Estudiantes: Investigación e Innovación en la DCNE, los días 23-25 de octubre de 2019.
- 1er lugar Nivel doctorado por la participación de presentación de cartel con título "Estudio computacional de blancos moleculares en vitíligo" en el V Simposio "Tendencias actuales en la búsqueda y desarrollo de fármacos" presentado en Ciudad Universitaria, CDMX el 21 de junio de 2019.