Informe de Actividades relacionadas con Supercómputo De Enero de 2016 a diciembre de 2016
Responsable: Juan Raúl Alvarez Idaboy

Colaboradores:

Dra. Annia Galano Jiménez
Dra. Annik Vivier Jegoux,
Dr. Jorge León Carmona
Dra. Adriana Pérez
Dra. Romina Castañeda Arriaga
Leonardo Muños Rugeles
Antonio Romero Silva,
Mirzam Carreon, González
Atzin Ruiz Llera
Adrian Cervantes Ortega

Resumen:

En el proyecto se usaron los métodos de la Química Cuántica y la Cinética Computacional para estudiar diferentes aspectos de reacciones involucradas en el estrés oxidativo. En particular los mecanismos de reacción y constantes de velocidad de reparación de radicales biológicos, neutralización de especies reactivas de oxígeno y acomplejamiento de metales para inhibir la reacción de Fenton.
Adicionalmente se creó en colaboración con el grupo de la Dra. Annia Galano de la UAM-I una metodología para calcular pKas de aminas, fenoles y ácidos carboxílicos usando cálculos DFT con una variedad de funcionales y bases.

Avances, Cálculos realizados y Software utilizado

Durante el año se pudieron realizar la inmensa mayoría de los cálculos planificados que consisten en realizar cómputos de energía libre de reactivos y productos, así como de estados de transición en casos que la cinética fuera favorable. En la mayoría de los cálculos se usó uno de los dos funcionales del grupo de Minnesota M05-2X y M06-2X y una base triple zeta: 6-311+G(d,p) o doble zeta: 6-31+G(d,p) dependiendo del tamaño del sistema. En determinados casos se hicieron cálculos CASSCF, MCQDPT y CCSD(T). Para los casos en que se usaron métodos DFT se usó el programa G09 y para los ab-initio multireferenciales y basados en la interacción de configuraciones se usaron ORCA Y GAMESS. En términos de colaboración se llevaron a cabo trabajos ya publicados en colaboración con los grupos de Nino Russo en Italia, Donald Truhlar en USA y Kavanal P. Prasanthkumar en la India. Además de la colaboración estrecha con la UAM-I
De esos resultados resulta relevante la profundización en el estudio del mecanismo PCET (proton coupled electron transfer) en que se han obtenido importantes resultados y que se han enviado a publicar. Desde el punto de vista de supercomputo se debe señalar el trabajo relacionado con el cálculo de los pKas que implicó un importante aporte de tiempo de cálculo ya que se estudiaron 74 métodos de cálculo para 90 ácidos y sus correspondientes bases conjugadas. En general se publicaron 10 artículos, algunos derivados del proyecto de

supercómputo del año anterior, pero algunos de los resultados de este año todavía no están publicados. En general consideramos que el uso de supercómputo está justificado y el proyecto ha sido exitoso.

Productos de la investigación

Artículos publicados)

1. Romina Castañeda-Arriaga, Annik Vivier-Bunge, J. Raul Alvarez-Idaboy: *Primary Antioxidant and Metal –Binding effects of Tiopronin: a Theoretical Investigation of its Action Mechanism*. Computational and Theoretical Chemistry, Volume 1077, 2016, Pages 48-57 (IF 1.403)
2. Gloria Mazzone, Annia Galano, Juan Raul Alvarez-Idaboy, Nino Russo: *Coumarin-Chalcone Hybrids as Peroxyl Radical Scavengers: Kinetics and Mechanisms*. Journal of Chemical Information and Modeling 2016, 56, 662−670 (IF 3.657)
3. Annia Galano, Gloria Mazzone, Ruslan Alvarez-Diduk, Tiziana Marino, J. Raul Alvarez-Idaboy, Nino Russo Food Antioxidants: Chemical Insights at the Molecular Level Annu. Rev. Food Sci. Technol. 2016. 7:335–52 (IF 6.950)
4. Annia Galano, Leonardo Muñoz-Rugeles, Juan Raul Alvarez-Idaboy, Junwei (Lucas) Bao, and Donald G. Truhlar Hydrogen Abstraction Reactions from Phenolic Compounds by Peroxyl Radicals: Multireference Character and Density Functional Theory Rate Constants J. Phys. Chem. A, 2016, 120, 4634−4642 (IF 2.883)
5. Adriana Pérez-González, Leonardo Muñoz-Rugeles, and Juan Raúl Alvarez-Idaboy: Tryptophan versus nitric oxide, nitrogen dioxide and carbonate radicals: differences in reactivity and implications for oxidative damage to proteins. Theoretical Chemistry Accounts (2016) 135:155 (IF 1.806)
6. Jorge Rafael Leon-Carmona, Annia Galano, J. Raul Alvarez-Idaboy: Deprotonation Routes of Anthocyanidins in Aqueous Solution, pKa Values, and Speciation under Physiological Conditions. RSC Advances 2016, 6, 53421 (IF 3.189)
7. Galano, Annia; Perez-Gonzalez, Adriana; Castaneda-Arriaga, Romina; Munoz-Rugeles, Leonardo; Mendoza-Sarmiento, Gabriela; Romero-Silva, Antonio; Ibarra-Escutia, Agustin; Rebollar-Zepeda, Aida Mariana; Leon-Carmona, Jorge Rafael; Hernandez-Olivares, Manuel Alejandro; and Juan Raul Alvarez-Idaboy "Empirically Fitted Parameters for Calculating pKa Values with Small Deviations from Experiments Using a Simple Computational Strategy" Journal of Chemical Information and Modeling (2016), 56(9), 1714-1724. (IF 3.657)
8. Kavanal P. Prasanthkumar, Juan R. Alvarez-Idaboy, Pavitra V. Kumar, Beena G. Singh and K. Indira Priyadarsini "Contrasting reactions of hydrated electron and formate radical with 2-thio analogues of cytosine and uracil" Phys. Chem. Chem. Phys., 2016,18, 28781-28790 (IF 4.449)

9. Romina Castañeda-Arriaga, J. Raul Alvarez-Idaboy and Nelaine Mora-Diez "Theoretical study of copper complexes with lipoic and dihydrolipoic acids" RSC Adv., 2016,6, 107924-107932 (IF 3.189)
10. Romina Castaneda-Arriaga,; Adrian Dominguez-Castro,; Jin Gyu Lee,; J. Raul Alvarez-Idaboy,; Nelaine Mora-Diez, Canadian Journal of Chemistry (2016), 94(12), 1119-1126 (IF 1.003)

Alumnos graduados:

Mirzam Carreón González. Nivel licenciatura

Trabajos presentados en congresos

1. 10th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications "Physicochemical Insights on the Protection Exerted by 3,5-Dihydroxy-4-methoxybenzyl alcohol (DHMBA) against Oxidative Stress" España, Junio 2016 Villuendas-Rey Yenny ; Alvarez-Idaboy Juan Raul ; Galano Annia

2. 51º Congreso Mexicano de Química "Estudio teórico de la actividad antioxidante del α-amino ácido Triptófano y sus metabolitos vía Transferencia Electrónica Simple. Pachuca, Septiembre 2016. Adriana Pérez-González, Annia Galano y J. Raúl Álvarez-Idaboy

3. XV Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica "Parámetros empíricamente ajustados para calcular valores de pKa utilizando una estrategia computacional simple". Mérida, Noviembre 2016 Galano, Annia; Perez-Gonzalez, Adriana; Castaneda-Arriaga, Romina; Munoz-Rugeles, Leonardo; Mendoza-Sarmiento, Gabriela; Romero-Silva, Antonio; Ibarra-Escutia, Agustin; Rebollar-Zepeda, Aida Mariana; Leon-Carmona, Jorge Rafael; Hernandez-Olivares, Manuel Alejandro; Juan Raul Alvarez-Idaboy

4. XLII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina "Chemical repair of protein radicals by biological relevant antioxidants" Uruguay, Noviembre 2016 Munoz-Rugeles, Leonardo, Juan Raul Alvarez-Idaboy.