REPORTE DE RESULTADOS OBTENIDOS EN 2016
(Dr. Lino Joel Reyes Trejo)

1. Con relación al estudio del mecanismo de la reacción de Baeyer-Villiger (BV) propuesto por nuestro grupo de investigación (Organic Letters, 8, 1763-1765, 2006), un grupo de investigadores chinos estudió la reacción de BV y cuestionó nuestros resultados. Esto produjo la necesidad de analizar teóricamente el artículo correspondiente (J. Phys. Chem. A 2012, 116, 2920−2926) para realizar los cálculos necesarios para dar respuesta al mencionado estudio y establecer que nuestro mecanismo explica correctamente los resultados obtenidos por ellos.

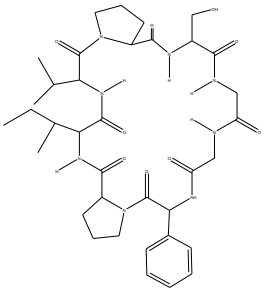
Actividad que se realizó: Se efectuaron los cálculos empleando el nivel de teoría: MPWB1K/6-311++G(d,p)-IEF-PCM// MPWB1K/6-311G(d,p), implementado en Gaussian 09.

Se está terminando de escribir el manuscrito del artículo correspondiente para enviar a J. Phys. Chem. A, para dar una respuesta adecuada al estudio de los autores chinos (J. Phys. Chem. A 2012, 116, 2920−2926).

2. La alumna de Doctorado en Ciencias Químicas, Ma. Rosa González Tepale (bajo mi tutoría) continuó desarrollando el proyecto: **Aislamiento y caracterización estructural de ciclopéptidos bioactivos obtenidos del bagazo de semillas de *Annona purpúrea***

Actividad que se realizó: En este período la alumna aisló un ciclopéptido al que llamó AK7 el cual purificó empleando diferentes condiciones en el equipo de espectrometría de masas MALDI-TOF para obtener el ion molecular. Las condiciones que resultaron adecuadas para el análisis fueron: matriz de ácido sinapínico, por el método de gota y exposición de laser de 2 ns, obteniéndose un pico intenso correspondiente a un ion molecular cargado m/z 755.335 [M+H] y el mismo ion multicargado [M+2H] m/z 756.332 y [M+3H] m/z 757.335.

A través de estudios de RMN bidimensional (COSY, HMBC, HSQC) se estableció presencia de los aminoácidos fenilalanina, dos glicinas y dos prolinas, isoleucina, valina y una serina. Se logró establecer la conectividad de glicina-glicina–serina. Sin embargo, aún se requiere modificar las condiciones de análisis en los estudios de RMN bidimensionales para terminar de establecer todos núcleos que corresponden a cada aminoácido y la secuencia entre ellos.



Propuesta de conectividad entre aminoácidos que componen al ciclopéptido AK7

Considerando la necesidad de apoyar teóricamente los estudios RMN de **secuenciación** de los aminoácidos en el ciclopéptido llamado AK7, se planteó determinar sus propiedades espectroscópicas, entre ellas, calcular los desplazamientos químicos de su espectro RMN de H^1 y C^{13} y compararlos con los experimentales, de acuerdo al protocolo seguido en: Tetrahedron, 2014, **70**, 7655-7663. Para lo cual se realizó un análisis conformacional de la estructura propuesta, usando el método de Monte Carlo con el campo de fuerza MMFF94 implementado en Spartan 10. Los confórméros más estables se optimizaron con cálculos DFT a nivel B3LYP/6-31G(d) para descartar los de misma energía. A los resultantes se les recalculó la energía con B3LYP/6-311++G(d,p) empleando el modelo disolvente SMD usando el paquete Gaussian 09. Los resultados obtenidos sobre el análisis conformacional del posible ciclopéptido no han resultado exitosos empleando el método de Monte Carlo, parece necesario utilizar otros programas de dinámica molecular como por ejemplo Amber. Adicionalmente, faltan estudios de tipo conformacional en varios disolventes para establecer conclusiones definitivas.

3. Con respecto al problema estructural del producto natural ácido polialtico obtenido de una planta medicinal:

Actividad que se realizó en Miztli: La estructura del ácido poliáltico (**1**) se determinó mediante FTIR, espectroscopía de RMN y cálculos DFT. El modelado molecular de **1** empleando el método de Monte Carlo, seguido de cálculos de optimización de geometría a nivel B3LYP/6-31(d) y el análisis poblacional de Boltzmann de las energías totales, detectó la presencia de los tres confórmeros más estables de este compuesto. Las buenas correlaciones observadas entre los desplazamientos químicos experimentales de ^1H y ^{13}C en cloroformo y los tensores de protección magnética isotrópica calculados con GIAO/B3LYP/6-31(d) para los confórmeros citados, confirmaron la geometría de 1.

Se envió el manuscrito a la revista Molecules con el siguiente título: Theoretical and experimental study of the Polyalthic acid structure. Lino Reyes*, Benito Reyes Trejo*, Diana Guerra Ramírez, Holber Zuleta-Prada, Marco Antonio Leyva-Ramírez, Nérida Cuautle Hernández.

A T E N T A M E N T E

Dr. Lino Joel Reyes Trejo

Laboratorio 208, Departamento de Química Orgánica
Div. de Estudios de Posgrado, Edificio B
Facultad de Química, UNAM.
Teléfono: 56-2238-02