INDICE DEL REPORTE

1. Título.

2. Resumen.

3. Descripción de avances.

4. Cálculos realizados.

5. Software utilizado.

6. Recursos utilizados.

7. Lista de colaboradores.

8. Lista de artículos publicados.

9. Lista de congresos nacionales y participantes.

REPORTE DE RESULTADOS utilizando la supercomputadora (Febrero 2016 a Enero 2017).

CÁLCULOS TEÓRICOS, CON ALGUNAS TÉCNICAS DE LA QUÍMICA CUÁNTICA-QUÍMICA COMPUTACIONAL, APLICADOS A COMPUESTOS CON INTERÉS QUÍMICO/BIOLÓGICO

2. RESUMEN

La caracterización estructural de los sistemas químicos es determinada por diferentes técnicas experimentales. Pero hoy en día, también es necesario usar otras metodologías como aquellas pertenecientes a la química cuántica-química computacional. Esta área contribuye a entender el comportamiento químico/biológico a nivel molecular. Estas técnicas teóricas no pretenden desplazar la caracterización a nivel experimental, sino complementar ya sea para predecir, explicar o simular un comportamiento químico. En la actualidad, es indiscutible para el químico y los profesionales de áreas afines, el empleo de estos métodos teóricos; de tal forma, que en nuestros días es ya una necesidad el hecho de que los futuros profesionales de las áreas de la química se relacionen lo más tempranamente posible con esta forma de trabajo. Con el apoyo de los recursos de supercómputo, hemos contribuido con determinaciones teóricas a nivel molecular para explicar el comportamiento de sistemas con interés químico-biológico, ya sea de compuestos sintetizados en laboratorio o aquellos obtenidos como metabolitos secundarios.

3. DESCRIPCIÓN DE AVANCES

Hasta el momento se ha determinado a nivel teórico propiedades electrónicas y espectroscópicas de una serie de derivados de perezona, producto natural, con posible actividad como antineoplásicos. Así como realizar la caracterización espectroscópica Infrarrojo de moléculas para que los alumnos verifiquen los diferentes modos vibracionales importantes para la identificación de una molécula. Así como la propuesta de un mecanismo de la transformación de la aflatoxina a un derivado menos tóxico.

4. CÁLCULOS REALIZADOS

- Optimización local y global de geometrías.
- Análisis de frecuencias.
- Cálculos de espectros IR, Raman.
- Cálculos de brechas HOMO-LUMO.
- Cálculos de entalpías.
- Búsqueda de estados de transición.

5. SOFTWARE UTILIZADO

Programa utilizado: Gaussian 09. Los métodos de cálculo que realizamos en nuestro grupo de trabajo son *Ab-initio*, DFT (Teoría de los Funcionales de la Densidad) y Métodos semiempíricos.

6. RECURSOS UTILIZADOS

Total: 425809.83

Saldo: -5809.8300000001

7. LISTA DE COLABORADORES

1. María Inés Nicolás Vázquez
2. René G. Escobedo González
3. Judith García Arellanes
4. Ma. Del Pilar Castañeda Arriaga
5. Juan M. Aceves Hernández
6. Abraham Méndez-Albores

8. PUBLICACIONES

a) Green Production of Indolylquinones, Derivatives of Perezone, and Related Molecules, Promising Antineoplastic Compounds.
René Gerardo Escobedo-González, Héctor Pérez Martínez, Ma. Inés Nicolás-Vázquez, Joel Martínez, Gabriela Gómez, Juan Nava Serrano, Vladimir Carranza Téllez, C. L. Vargas-Requena, René Miranda Ruvalcaba.
Journal of Chemistry. 2016, 1-10.
http://dx.doi.org/10.1155/2016/3870529

b) A Theoretical Study of 8-Chloro-9-Hydroxy-Aflatoxin B1, the Conversion Product of Aflatoxin B1 by Neutral Electrolyzed Water.
René Escobedo-González, Abraham Méndez-Albores, Tania Villarreal-Barajas, Juan Manuel Aceves-Hernández, René Miranda-Ruvalcaba, Inés Nicolás-Vázquez.
Toxins, 2016, 8, 225, 1-19.
DOI:10.3390/toxins8070225

9. PARTICIPACIÓN A CONGRESOS NACIONALES -PARTICIPANTES

a) Segundo Congreso de Ciencia, Educación y Tecnología 2016.
FESC.UNAM, Cuautitlán Izcalli, Edo. de México. Celebrado del 27 al 30 de Junio del **2016**.
Prueba piloto de un programa de química especializado con alumnos de licenciatura en la determinación de espectros de infrarrojo.
Judith García Arellanes, Ma. Del Pilar Castañeda Arriaga, René G. Escobedo González, Juan M. Aceves Hernández, Ma. Inés Nicolás-Vázquez.

b) 51º Congreso Mexicano de Química-35º Congreso Nacional de Educación Química
Pachuca de Soto, Hidalgo, México. 28 de Septiembre – 1o de Octubre **2016**
Espectroscopia Infrarroja a nivel teórico, como técnica para la integración en la enseñanza-aprendizaje
René G. Escobedo González, Judith García Arellanes, Ma. Del Pilar Castañeda Arriaga, Juan M. Aceves Hernández, Ma. Inés Nicolás-Vázquez.

c) XIV Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica.
Celebrada en la Cd. de Mérida, Yuc. México, los días 17, 18 y 19 de Noviembre de **2016**.
Estudio teórico de la conversión de la aflatoxina B1 a 8-cloro-9-hidroxi-aflatoxina B1 por tratamiento con NEW.
René Escobedo-González, Abraham Méndez-Albores, Tania Villarreal-Barajas, Juan Manuel Aceves-Hernández, René Miranda-Ruvalcaba, Inés Nicolás-Vázquez

PROBATORIOS A CONGRESOS

a)

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MEXICO
Facultad de Estudios Superiores Cuautitlán

42 ANIVERSARIO

Otorga el presente

SEGUNDO CONGRESO

SEGUNDO CONGRESO
DE CIENCIA, EDUCACIÓN Y TECNOLOGÍA

RECONOCIMIENTO

A:

Judith García Arellanes, Ma. Del Pilar Castañeda Arriaga, René G. Escobedo González, Juan M. Aceves Hernández, Ma. Inés Nicolás Vázquez

Por su valiosa participación con el trabajo titulado:

Prueba piloto de un programa de química especializado con alumnos de licenciatura en la determinación de espectros de infrarrojo

Que se presentó en el Segundo Congreso de Ciencia, Educación y Tecnología, que se llevó a cabo del 27 al 30 de junio de 2016 en las instalaciones de esta Facultad

"POR MI RAZA HABLARÁ EL ESPÍRITU"
Cuautitlán Izcalli, Estado de México, junio de 2016

SEGUNDO CONGRESO CIENCIA, EDUCACIÓN Y TECNOLOGÍA
EDUCACIÓN Y TECNOLOGÍA

Dra. Alma Luisa Revilla Vázquez
Jefa de la División de Ciencias Químico Biológicas

C12

SEGUNDO CONGRESO DE CIENCIA, EDUCACIÓN Y TECNOLOGÍA 2016

ESTUDIO PRUEBA PILOTO DE UN PROGRAMA DE QUIMICA ESPECIALIZADO CON ALUMNOS DE LICENCIATURA EN LA DETERMINACION DE ESPECTROS DE INFRARROJO.

Judith García Arellanes, Ma. Del Pilar Castañeda Arriaga, René G. Escobedo González*, Juan M. Aceves Hernández, Ma. Inés Nicolás-Vázquez.

Departamento de Ciencias Químicas, Facultad de Estudios Superiores Cuautitlán, Universidad Nacional Autónoma de México, Cuautitlán Izcalli, Estado de México 54714. *Instituto de ciencias biomédicas, Universidad Autónoma de Ciudad Juárez Correo: maestra3judithgarcia@hotmail.com

Introducción

Al enseñar los fundamentos de la espectroscopia infrarroja es difícil que el alumno observe los diferentes modos de vibración en un espectro obtenido a nivel experimental, él lo que observa son las longitudes de onda a la que se llevan esas vibraciones. Este comportamiento químico se podría entender mejor al visualizarlo y esto se lograría al realizar la determinación del Infrarrojo con un programa especializado de química. Por lo tanto el objetivo de este trabajo fue aplicar a un grupo de alumnos el material que se utilizaría para la determinación de espectros al Infrarrojo, para evaluar su aplicabilidad. Mediante una serie de preguntas que el alumno contesto después de realizar una práctica para la determinación del Infrarrojo de moléculas conocidas, se examinó que el semestre y carrera influía para la asimilación del concepto.

Metodología

Para evaluar su aplicabilidad, se reunió a un grupo de alumnos a los que se les asignó en pares una computadora y se les instruyó sobre el uso del software para después interactuar con su contenido y determinación del espectro de Infrarrojo de moléculas conocidas, acto seguido, respondieron una encuesta escrita de 20 preguntas sobre su experiencia.

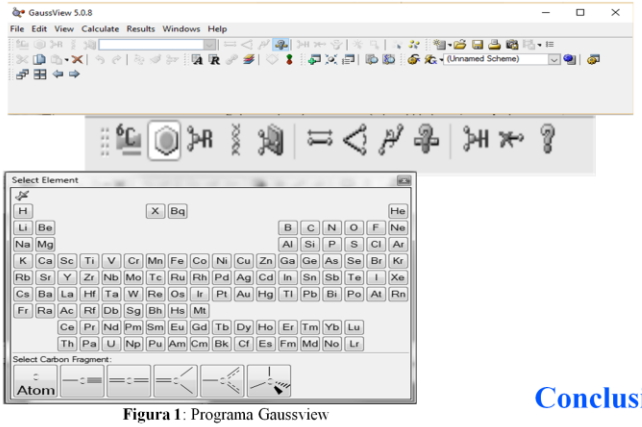

Figura 1: Programa Gaussview

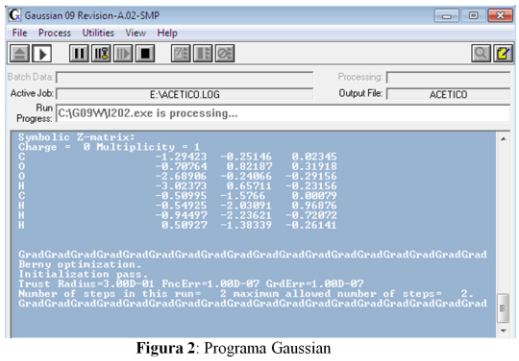

Figura 2: Programa Gaussian

Resultados

El alumno manejo el software sin problemas, Figura 1-2, claro está bajo asesoría del profesor, opinó que esta forma de trabajo favorece el aprendizaje individual, grupal y colectivo. Logró despertar mayor interés en el tema en estudio y considera que es didáctico para la finalidad con la que ha sido diseñado, Figura 3. La herramienta utilizada apoya al medio tradicional utilizado en contextos de enseñanza presencial.

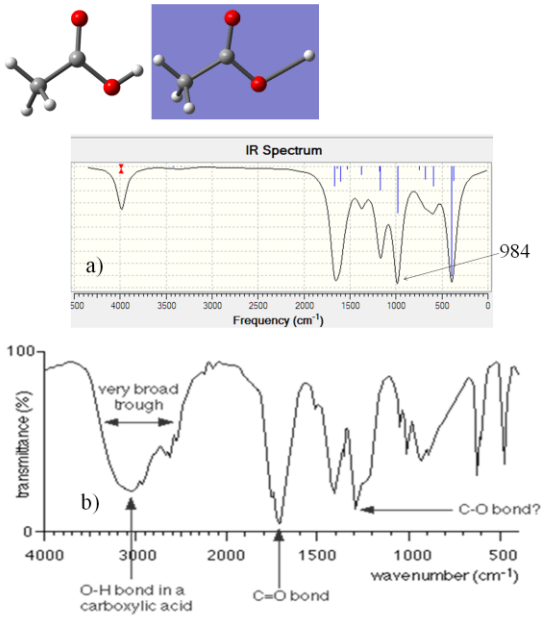

Figura 3: **a)** Espectro Infrarrojo teórico de la molécula de acido acético. Esta molécula muestra 18 modos de vibración: Modo 18 = 3869 cm^{-1} (alargamiento O-H). Modo 14 = 1070 cm^{-1} (alargamiento C=O). Modo 10 = 1476 cm^{-1} (Flexión en el plano). Modo 7 = 984 (alargamiento asimétrico C-O). **b)** Espectro Infrarrojo experimental.

Conclusiones

Esta forma de trabajar fomenta la socialización de la información científica. El alumno desarrolla el manejo de habilidades cognoscitivas de orden superior como lo son: comprensión, análisis, manipulación. Aplica sus conocimientos adquiridos en sus asignaturas reforzando su aprendizaje e integra sus conocimientos. Maneja tecnologías de la información y comunicación para habilitarse en el manejo de la computación y la computadora utilizando software especializado de química. Desarrolla capacidades para argüir y justificar resultados científicos. Desarrolla capacidades para detectar inconsistencias entre un contexto real y uno simulado.

Referencias

*Silverstein, R. M., Bassler, G. C., Morrill, T. C. Identificación Espectrométrica de Compuestos Orgánicos. Ed. Diana México, 1980.

* Gaussian 09, Revision A.02. Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2009.

Agradecimientos: Los autores desean agradecer el apoyo recibido del proyecto: **FESC-PIAPIME 2016 ID 2.12.01.16 .** DGTIC-UNAM: **SC16-1-IR-27**

b)

SOCIEDAD QUÍMICA DE MÉXICO, A.C.

"La química nos une."

otorga el presente

Reconocimiento

a

Rene Gerardo Escobedo González, Judith García Arrellanes, Ma. Del Pilar Castañeda Arriaga, Juan Manuel Aceves Hernández, Ma. Inés Nicolás Vázquez.

por su participación presentando el ***Trabajo Profesional en Modalidad Cartel*** *titulado*

Espectroscopia infrarroja a nivel teórico, como técnica para la integración en la enseñanza-aprendizaje.

EDUQ-P29-C

en el marco de las actividades del

51º Congreso Mexicano de Química

35º Congreso Nacional de Educación Química

Pachuca de Soto, Hidalgo, México.

28 de Septiembre a 1 de Octubre de 2016

Dr. Benjamín Velasco Bejarano *Presidente Nacional* *Sociedad Química de México, A.C.*	*Dra. María del Jesús Rosales Hoz* *Presidente de Congresos* *Sociedad Química de México, A.C.*	*Dr. Antonio Rafael Tapia Benavides* *Presidente Local de Congresos, 2016* *UAEH*

Espectroscopía Infrarroja a nivel teórico, como técnica para la integración en la enseñanza-aprendizaje

René G. Escobedo González, **Judith García Arellanes,*** Ma. Del Pilar Castañeda Arriaga, Juan M. Aceves Hernández, Ma. Inés Nicolás-Vázquez.

Departamento de Ciencias Químicas, Facultad de Estudios Superiores Cuautitlán, Universidad Nacional Autónoma de México, Cuautitlán Izcalli, Estado de México 54714. *Instituto de Ciencias Biomédicas, Universidad Autónoma de Ciudad Juárez Correo: maestra3judithgarcia@hotmail.com

VNIVERSIDAD NACIONAL AVTONOMA DE MEXICO

EDUQ-P29-C

Objetivo

El objetivo de este trabajo es contribuir al mejoramiento de la enseñanza-aprendizaje de la técnica de espectroscopía infrarroja mediante el desarrollo de un manual de prácticas que permitan al alumno hacer uso de un programa químico especializado para determinar, visualizar e interpretar espectros Infrarrojo y los modos vibracionales a nivel teórico.

Introducción

La importancia de la espectroscopía Infrarroja es relevante, dado que apoya a la determinación de grupos funcionales, de utilidad en el quehacer científico, docente y laboral.

Con el fin de facilitar la interpretación de los espectros de IR emanados de la parte experimental, se propone el empleo de metodología teórica (programa de química especializado), que permita de una manera amigable e interactiva integrar los fundamentos, espectros obtenidos en el laboratorio y correlacionarlos con los espectros teóricos.

La información teórica no solo es un complemento a los datos experimentales, sino que también es auxiliar en la asignación de funcionalidades, posiciones de la banda, la intensidad de la absorción, así como también de forma animada permite visualizar los diferentes modos vibracionales (flexiones y alargamientos).

El uso de esta herramienta refuerza el aprendizaje, pues apoya al medio tradicional utilizado en contextos de enseñanza presencial y virtual.

Agradecimientos: Los autores desean agradecer el apoyo recibido del proyecto: FESC-PIAPIME 2016 **ID 2.12.01.16 .** DGTIC-UNAM-**SC16-1-IR-27**

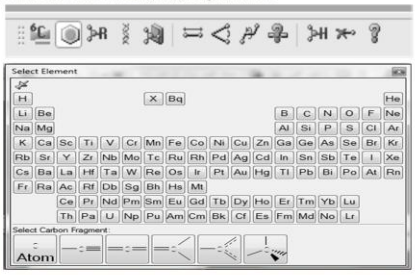

Figura 1. Barra de menú y barra de herramientas del programa Gaussview 5.08.

Figura 2. Modelado y optimización de la molécula de ácido acético con el programa Gaussview 5.08.

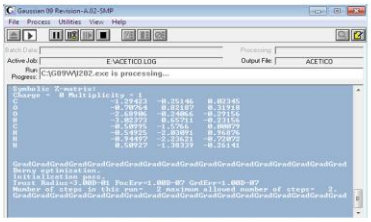

Figura 3. Sección del procesamiento del cálculo teórico para la determinación del espectro IR de la molécula de ácido acético con el programa **Gaussian 09.

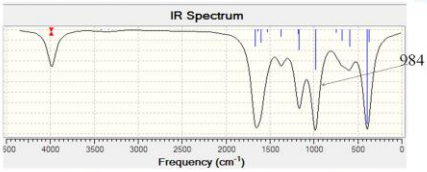

Figura 4: Espectro Infrarrojo teórico de la molécula de ácido acético. Esta molécula muestra 18 modos de vibración: Modo 18 = 3869 cm^{-1} (alargamiento O-H). Modo 14 = 1070 cm^{-1} (alargamiento C=O). Modo 10 = 1476 cm^{-1} (Flexión en el plano). Modo 7 = 984 (alargamiento asimétrico C-O).

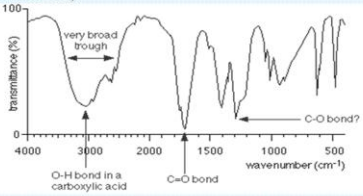

Figura 5. ***Espectro Infrarrojo experimental de la molécula de acido acético.

Metodología

En primera instancia, se seleccionaron 5 moléculas, con una diversidad estructural que permite ejemplificar las bandas de las funcionalidades en las distintas zonas del espectro de infrarrojo estudiado (600 a 4000 cm^{-1}) y que a su vez presentan en la literatura sus espectros a nivel experimental. Acto seguido se determinaron los espectros de IR a nivel teórico con los Programas Gaussian 09 y Gaussview 5,08 (Figuras 1-5).

Resultados

Los espectros determinados a nivel teórico muestran bandas con una tendencia similar a los espectros experimentales. Sin embargo esta forma de trabajar permite visualizar de una forma accesible las bandas, modos vibracionales e inclusive correlacionar la asignación de un espectro experimental.

El manual planteado (75% avance) sigue la propuesta de Hornback, en la cual el espectro de infrarrojo la divide en zonas: Zona del hidrógeno (4000-2500 cm^{-1}), zona del triple enlace (2300 a 2000 cm^{-1}) y la zona del doble enlace (1900-1500 cm^{-1}); con base a esto se han desarrollado las practicas correspondientes a compuestos con bandas características en cada zona.

Conclusiones

La espectroscopía a nivel teórico permite, determinar, visualizar, interpretar y analizar los espectros Infrarrojo, así como los modos vibracionales y correlacionarlos con aquellos reportados a nivel experimental. Esta forma de trabajo favorece el proceso de enseñanza-aprendizaje, permite el desarrollo de capacidades para argüir y justificar resultados científicos, el desarrollo de capacidades para detectar inconsistencias entre un contexto real y uno simulado.

Referencias

** Gaussian 09, Revisión A.02. Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2009.

***Silverstein, R. M., Bassler, G. C., Morrill, T. C. Identificación Espectrométrica de Compuestos Orgánicos. Ed. Diana México, 1980.

b).

El Comité Local y Nacional de la *XV* Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica otorga el presente

R E C O N O C I M I E N T O

a

René Escobedo-González, Abraham Méndez-Albores, Tania Villarreal-Barajas, Juan Manuel Aceves-Hernández, René Miranda-Ruvalcaba, Inés Nicolás-Vázquez

por presentar el Cartel titulado:

Estudio teórico de la conversión de la aflatoxina B1 a 8-cloro-9-hidroxi-aflatoxina B1 por tratamiento con NEW

dentro de la Reunión celebrada en la Cd. de Mérida, Yuc. México, los días 17, 18 y 19 de Noviembre de 2016

Dr. Gabriel Merino
Representante del Comité Local y Nacional
de la XV Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica

XV Reunión Mexicana de Fisicoquímica Teórica

C04

ESTUDIO TEÓRICO DE LA CONVERSIÓN DE LA AFLATOXINA B1 A 8- CLORO-9-HIDROXI-AFLATOXINA B1 POR TRATAMIENTO CON NEW

René Escobedo-González[1], Abraham Méndez-Albores[2], Tania Villarreal-Barajas[3], Juan Manuel Aceves-Hernández[1], René Miranda-Ruvalcaba[1], Inés Nicolás-Vázquez[1].

[1]UNAM–FESC. Campo 1.Departamento de ciencias químicas, Cuautitlán Izcalli.

[2]UNAM–FESC. Campo 4. Unidad de investigación multidisciplinaria L14 (Alimentos,Micotoxinas y Micotoxicosis), Cuautitlán Izcalli 54714; México

[3] Esteripharma SA de CV. Atlacomulco 50450, México; renegerardo.escobedo@gmail.com

Introducción

Las aflatoxinas son micotoxinas carcinogénicas que contaminan granos y cereales que representan un problema serio en humanos y ganado, así como efectos graves para la economía agrícola[1]. En años recientes se ha desarrollado un método de desintoxicación para la aflatoxina B1 que resulta amigable para el ambiente, el cual consiste en el lavado de los granos en agua neutra electrolizada (NEW por sus siglas en inglés)[2]. Trabajos previos han indicado que este método elimina los efectos citotóxicos de la aflatoxina B1 por ruptura del doble enlace presente en el anillo furánico terminal de la aflatoxina B1 transformándose en la 8-cloro-9-hidroxiaflatoxina B1[3]. El objetivo del presente trabajo fue realizar un estudio teórico de la molécula 8-cloro-9-hidroxiaflatoxina B1, determinando propiedades estructurales, electrónicas y espectroscópicas con el nivel de teoría DFT. También fue propuesto un mecanismo considerando dos rutas posibles. Determinándose los perfiles energéticos, intermediarios y estados de transición mediante los orbitales frontera, para la formación de 8-cloro-9-hidroxi-aflatoxina B1 a partir de la aflatoxina B1.

Metodología computacional

Resultados

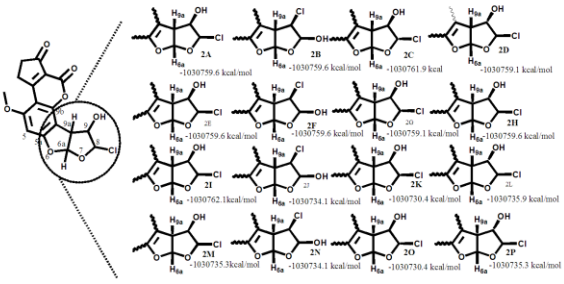

Figura 1. Conformeros del 8-cloro-9-hidroxi-Aflatoxina

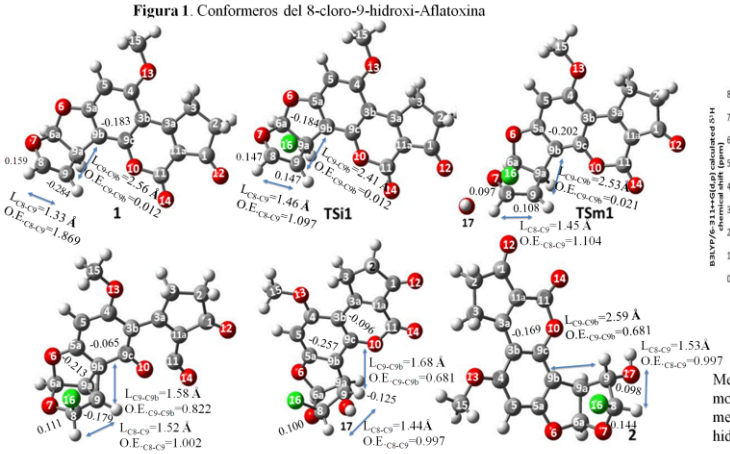

Figura 2. Estructuras de las moléculas e intermediarios, con algunas propiedades, involucrados en el mecanismo NEW

AGRADECIMIENTOS: Los autores desean agradecer el apoyo recibido de los proyectos: UNAM-PAPITT IN221514-3, DGTIC-UNAM **SC16-1-IR-27** y CONACyT 249922.

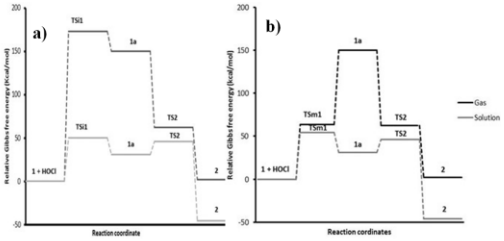

Figura 3. Perfiles energéticos en fase gas y disolución acuosa de a) Mecanismo iónico b) Mecanismo molecular.

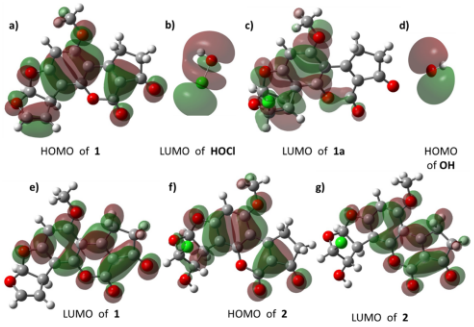

Figura 4. Orbitales moleculares HOMO-LUMO, de las especies involucradas en el mecanismo.

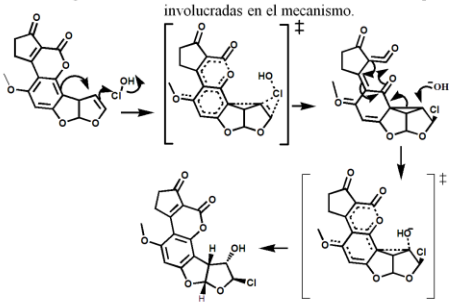

Figura 5. Propuesta de mecanismo de reacción

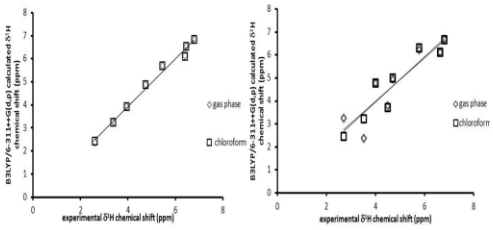

Figura 6.Correlacion de δ^1H para la aflatoxina B1 y su derivado

CONCLUSIONES

Mediante esta metodología teórica, se llevó acabo un análisis de las propiedades moleculares de un derivado de Aflatoxina B1. Así como una propuesta mecanística validada para la conversión de Aflatoxina B1 en 8-cloro-9-hidroxiaflatoxina B1 mediante el proceso NEW.

REFERENCIAS

[1] Méndez-Albores, J.; Villa, G.; Rio-Garcia, D.; Martinez, E. Aflatoxin-detoxification achieved with Mexican traditional nixtamalization process (MTNP) is reversible. *J. Sci. Food Agric.* **2004**, *84*, 1611–1614. [2]Jardon-Xicotencatl, S.; Díaz-Torres, R.; Marroquin-Cardona, A.; Villarreal-Barajas, T.; Méndez-Albores, A. Detoxification of Aflatoxin-Contaminated Maize by Neutral Electrolyzed Oxidizing Water. *Toxins* **2015**, *7*, 4294–4314. [3]Escobedo-González, R., Méndez-Albores, A., Villarreal-Barajas, T., Aceves-Hernández, J. M., Miranda-Ruvalcaba, R., & Nicolás-Vázquez, I. (2016). A Theoretical Study of 8-Chloro-9-Hydroxy-Aflatoxin B1, the Conversion Product of Aflatoxin B1 by Neutral Electrolyzed Water. Toxins, 8(7), 225.