

Memoria

11a Reunión de Resonancia Magnética Nuclear Experimental



USBI, Xalapa, Veracruz. México
2025

RESUMEN

La 11^a Reunión de Resonancia Magnética Nuclear Experimental (RRMNE) se llevó a cabo los días 28 y 29 de agosto de 2025 en la Universidad Veracruzana, Xalapa, Veracruz, con sede en la Sala de Videoconferencias de la USBI. Este encuentro, organizado en colaboración con la Sociedad Mexicana de Resonancia Magnética Nuclear (SOMERMN) y diversas instituciones de investigación y educación superior, reunió a investigadores, académicos y estudiantes de licenciatura y posgrado interesados en la aplicación de la resonancia magnética nuclear (RMN) en diferentes áreas de la ciencia. El objetivo principal de la reunión fue difundir herramientas teóricas y experimentales de la RMN, propiciando un espacio de actualización, formación y colaboración. Los participantes discutieron los avances metodológicos y aplicaciones en problemas de frontera, destacando la versatilidad de la técnica en la caracterización de sistemas moleculares, la elucidación estructural y el análisis de procesos dinámicos. La 11^a RRMNE abordó un programa académico amplio y diverso, con 14 ponencias plenarias, 9 presentaciones orales cortas (*Flash*) y 42 trabajos presentados en la exposición de carteles. Estas modalidades permitieron tanto la participación de investigadores consolidados como la incorporación de jóvenes científicos y estudiantes, favoreciendo la construcción de redes de colaboración interinstitucional. Los tópicos centrales incluyeron:- Síntesis orgánica- Metabolómica- Productos naturales- Estructura de proteínas- Quimiometría- Química del estado sólido- Química inorgánica- Síntesis de péptidos. La presencia de especialistas en estas áreas permitió un diálogo interdisciplinario, mostrando cómo la RMN se ha consolidado como una técnica transversal que impacta desde la investigación básica hasta aplicaciones en biomedicina, farmacología, química de materiales y ciencias ambientales. En el ámbito formativo, la reunión ofreció cursos previos especializados, diseñados para introducir a los estudiantes en técnicas de adquisición, procesamiento e interpretación de datos espectroscópicos. Este componente académico refuerza la misión de la SOMERMN de fomentar la capacitación continua y la generación de

nuevas vocaciones científicas. El evento también contó con el respaldo de empresas líderes en instrumentación científica (entre ellas Aureus, Bruker, CEERLAB, JEOL, Magritek y MASTER LEAV), que dieron a conocer innovaciones tecnológicas y plataformas emergentes para la adquisición y análisis de datos de RMN. Esta interacción entre academia e industria abrió la posibilidad de vinculaciones estratégicas para proyectos de investigación y formación técnica. En conjunto, la 11^a. RRMNE reafirmó su papel como foro nacional de referencia en el ámbito de la resonancia magnética nuclear, contribuyendo al fortalecimiento de la comunidad científica mexicana y latinoamericana. La reunión cumplió con el propósito de actualizar conocimientos, promover colaboraciones y visibilizar la importancia de la RMN en la resolución de problemas científicos y tecnológicos de alta relevancia.

Finalmente, se destacó la importancia de continuar con este tipo de encuentros periódicos para consolidar una comunidad multidisciplinaria, fortalecer el intercambio de experiencias y promover que nuevas generaciones de científicos encuentren en la RMN una herramienta de investigación con gran potencial.

La Memoria de la 11^a RRMNE son el resultado del esfuerzo conjunto de asistentes, ponentes, organizadores y patrocinadores, quienes hicieron posible este espacio de encuentro académico. Este documento refleja no solo los avances científicos y tecnológicos presentados, sino también el compromiso de la comunidad con la formación de nuevas generaciones, la construcción de redes de colaboración y la consolidación de la resonancia magnética nuclear como herramienta estratégica para el desarrollo científico en México, con incidencia en otros países de la región.

Índice

Índice	Página
Comité SOMERMN y Comité Local	001
Entidades participantes y Agradecimientos especiales	004
Programa	008
Patrocinadores	011
Presentaciones magistrales	013
Presentaciones Flash	028
Presentaciones cartel	042
Premiación	091
Fotos	098

Comité
SOMERMN

Comité
Local

COMITÉ SOMERMN

Armando Ariza Castolo- CINVESTAV

Presidente de la SOMERMN

Ernesto Sánchez Mendoza - UAM-Xochimilco

Secretario de la SOMERMN

Federico del Río Portilla - IQ, UNAM

Tesorero de la SOMERMN

Alan Carrasco Carballo

LESQO ICUAP BUAP, Puebla

Alma L. Saucedo Yañez

**SECIHTI - Laboratorio Nacional de Investigación y Servicio Agroalimentario y
Forestal, Universidad Autónoma Chapingo (LANISAF, UACH)**

Blanca E. Domínguez Mendoza

UAEM, Morelos

Julia Cassani Hernández

UAM-Xochimilco, CDMX

María de los Ángeles Ramírez Cisneros

UAEM, Morelos

Norma F. Santos Sánchez

Universidad Tecnológica de la Mixteca, Oaxaca

COMITÉ LOCAL

Ricardo Tovar Miranda

Instituto de Ciencias Básicas, Universidad Veracruzana

Omar Cortezano Arellano

Instituto de Ciencias Básicas, Universidad Veracruzana

Tomás Guerrero Briseño

Instituto de Ciencias Básicas, Universidad Veracruzana

Esther Emilia Olivares Aburto

Instituto de Ciencias Básicas, Universidad Veracruzana

Entidades participantes

Agradecimientos especiales

ENTIDADES PARTICIPANTES

Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del Instituto Politécnico Nacional
(CINVESTAV)

Instituto de Ciencias Básicas, Universidad Veracruzana (**UV**)

Instituto de Química, Universidad Nacional Autónoma de México (**IQ, UNAM**)

Laboratorio de Espectroscopia y Química Orgánica del Instituto de Ciencias de la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla (**LESQO ICUAP BUAP**)

SECIHTI - Laboratorio Nacional de Investigación y Servicio Agroalimentario y Forestal, Universidad Autónoma Chapingo (**LANISAF, UACH**)

Universidad Autónoma de México, Unidad Xochimilco (**UAM-X**)

Universidad Autónoma del Estado de Morelos (**UAEM**)

Universidad Tecnológica de la Mixteca (**UTM**)



AGRADECIMIENTOS ESPECIALES

Agradecimiento especial a los siguientes investigadores por su contribución en la evaluación de trabajos en modalidad cartel y/o presentaciones *flash*:

- Alan Carrasco Carballo

Laboratorio de Espectroscopía y Química Orgánica del Instituto de Ciencias de la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla (**LESQO ICUAP BUAP**)

- Alberto Sánchez Medina

Instituto de Química Aplicada, **Universidad Veracruzana**

- Alma L. Saucedo Yañez

SECIHTI - Laboratorio Nacional de Investigación y Servicio Agroalimentario y Forestal, Universidad Autónoma Chapingo (**LANISAF, UACH**)

- Armando Ariza Castolo

Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del Instituto Politécnico Nacional (**CINVESTAV**)

- Blanca E. Domínguez Mendoza

Universidad Autónoma del Estado de Morelos (**UAEM**)

- Braulio Rodríguez Molina

Instituto de Química, **UNAM**

- David Flores

Research Group Protein structure determination using NMR. **Max Planck Institute**, Alemania

- David Morales Morales

Instituto de Química, **UNAM**

- Ernesto Sánchez Mendoza

Universidad Autónoma de México, Unidad Xochimilco (**UAM-X**)

- Gabriela Alejandra Sosa Ortiz

Instituto de Ciencias Básicas, **Universidad Veracruzana**

- Gerardo Cedillo Valverde

Instituto de Investigaciones en Materiales, **UNAM**.

- Isaac F. Céspedes Camacho

Escuela de Química, Tecnológico de Costa Rica

- José Albano Pérez Bautista

Instituto de Ciencias Básicas, **Universidad Veracruzana**

- José Iván Serrano Contreras

Imperial College London, Reino Unido

- Lemuel Pérez Picaso

Universidad del Papaloapan (**UNPA**)

- Marco A. Vera Ramírez

Universidad Autónoma de México, Unidad Iztapalapa (**UAM-I**)

- María de los Ángeles Ramírez Cisneros

Universidad Autónoma del Estado de Morelos (**UAEM**)

- Norma F. Santos Sánchez

Universidad Tecnológica de la Mixteca (**UTM**)

- Nury Pérez Hernández

Escuela Nacional de Medicina y Homeopatía, **IPN**

- Omar Cortezano Arellano

Instituto de Ciencias Básicas, **Universidad Veracruzana**

- Oscar García Barradas

Instituto de Ciencias Básicas, **Universidad Veracruzana**

- Ricardo Tovar Miranda

Instituto de Ciencias Básicas, **Universidad Veracruzana**

- Tomás Guerrero Briseño

Instituto de Ciencias Básicas, **Universidad Veracruzana**

- Verónica Mayela Rivas Galindo

Facultad de Medicina, **Universidad Autónoma de Nuevo León**

Programa

11a Reunión de Resonancia Magnética Nuclear Experimental

28
 AGOSTO

PROGRAMA

Horario	Evento	Ponente
08:30 - 09:00	Registro	
09:00 - 09:30	Inauguración	
09:30 - 10:20	Fenómenos de hiperpolarización	Isaac F. Céspedes Camacho Escuela de Química, Tecnológico de Costa Rica
10:20 - 10:55	Cocristales termosalientes	Braulio Rodríguez Molina Instituto de Química, UNAM
10:55 - 11:15	Receso/café	
11:15 - 11:50	Síntesis y caracterización de derivados fluorescentes de bencimidazol y anhídrido naftálico	Oscar García Barradas Instituto de Química Aplicada, Universidad Veracruzana
11:50 - 12:10	Presentaciones <i>Flash</i> (1-4)	
12:10 - 13:00	Biología estructural y resonancia magnética nuclear (parte 1)	David Flores Research Group Protein structure determination using NMR. Max Planck Institute, Alemania.
13:00 - 14:00	Primera sesión de Carteles	
14:00 - 16:00	Comida	
16:00 - 16:50	Part I – Application of ConArch + (Configurational and Conformational Architect) to the 3D Structure Analysis of Small Molecules	Roberto Gil Department of Chemistry Carnegie Mellon University, EEUU
16:50 - 17:00	Presentaciones <i>Flash</i> (5 y 6)	
17:00 - 17:35	Aplicaciones de la RMN en la solución de problemas agroforestales de importancia económica	José Luis Olivares Instituto de Ecología, A.C.
17:35 - 18:10	Relevancia de la RMN en Química Organometálica y de Coordinación	David Morales Morales Instituto de Química, UNAM

PATROCINADORES:



COMITÉ ORGANIZADOR:

11a Reunión de Resonancia Magnética Nuclear Experimental

29
AGOSTO

PROGRAMA

Horario	Evento	Ponente
9:00 - 9:35	Metabolómica por RMN ^1H de muestras comerciales de café veracruzano	Alberto Sánchez Medina Instituto de Química Aplicada, Universidad Veracruzana
9:35 - 10:10	Ánalisis completo de espines de metabolitos con estructuras poco comunes	Verónica Rivas Galindo Facultad de Medicina, Universidad Autónoma de Nuevo León
10:10 - 10:25	Presentaciones <i>Flash</i> (7-9)	
10:25 - 11:00	Aplicaciones de RMN utilizando ^{129}Xe	Isaac F. Céspedes Camacho Escuela de Química, Tecnológico de Costa Rica
11:00 - 11:30	Receso/cafés	
11:30 - 12:20	Empleo de experimentos del tipo pure shift para la identificación de metabolitos en muestras clínicas	José Iván Serrano Contreras Imperial College London, Reino Unido
12:20 - 12:55	De Moléculas a Metabolomas: El Poder de la RMN en la Investigación Bioquímica	Nury Pérez Hernández Escuela Nacional de Medicina y Homeopatía, IPN
12:55 - 14:00	Segunda sesión de carteles	
14:00 - 16:00	Comida	
16:00-16:50	Part II – rDG/DDD Analysis: From NMR Data to Molecular Structure	Roberto Gil Department of Chemistry Carnegie Mellon University, EEUU
16:50 - 17:00	Presentaciones <i>Flash</i> 10 y 11	
17:00 - 17:35	Estructura de proteínas	Federico del Río Portilla Instituto de Química, UNAM
17:35 - 17:45	Entrega de premios	Armando Ariza Castolo Presidente SOMERMN
17:45 - 18:10	Clausura de la 11a RRMNE	

PATROCINADORES:



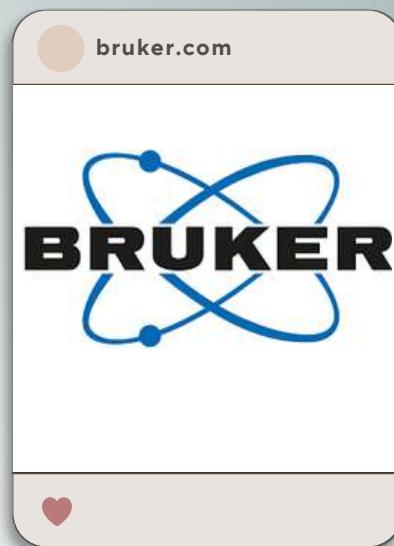
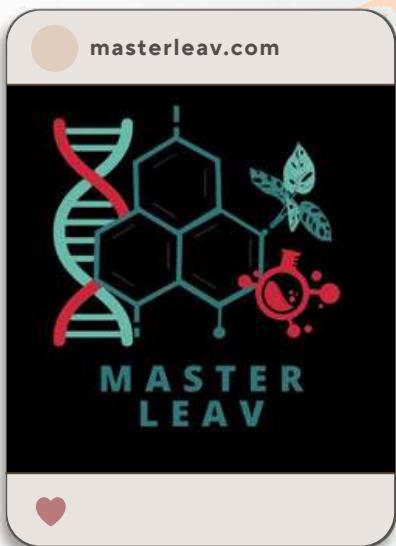
COMITÉ ORGANIZADOR:



Patrocinadores



PATROCINADORES



Presentaciones magistrales

CONFERENCIAS MAGISTRALES

No.	Nombre del trabajo-Autor(es)-Adscripción	No. página
P01	Fenómenos de hiperpolarización Isaac F. Céspedes Camacho Escuela de Química, Tecnológico de Costa Rica	016
P02	Cocristales termosalientes Braulio Rodríguez Molina Instituto de Química, UNAM	017
P03	Síntesis y caracterización de derivados fluorescentes de bencimidazol y anhídrido naftálico Oscar García Barradas Instituto de Química Aplicada, Universidad Veracruzana	018
P04	Biología estructural y resonancia magnética nuclear (parte 1) David Flores Research Group Protein structure determination using NMR. Max Planck Institute, Alemania	019
P05	Part I – Application of ConArch + (Configurational and Conformational Architect) to the 3D Structure Analysis of Small Molecules Roberto Gil Department of Chemistry Carnegie Mellon University, EEUU	020
P06	Aplicaciones de la RMN en la solución de problemas agroforestales de importancia económica José Luis Olivares Instituto de Ecología, A.C.	021
P07	Relevancia de la RMN en Química Organometálica y de Coordinación David Morales Morales Instituto de Química, UNAM	---
P08	Metabolómica por RMN 1H de muestras comerciales de café veracruzano Alberto Sánchez Medina Instituto de Química Aplicada, Universidad Veracruzana	---
P09	Ánálisis completo de espines de metabolitos con estructuras poco comunes Verónica Rivas Galindo Facultad de Medicina, Universidad Autónoma de Nuevo León	022
P10	Aplicaciones de RMN utilizando 129Xe Isaac F. Céspedes Camacho Escuela de Química, Tecnológico de Costa Rica	023
P11	Empleo de experimentos del tipo pure shift para la identificación de metabolitos en muestras clínicas José Iván Serrano Contreras Imperial College London, Reino Unido	024

CONFERENCIAS MAGISTRALES

No.	Nombre del trabajo-Autor(es)-Adscripción	No. página
P12	De Moléculas a Metabolomas: El Poder de la RMN en la Investigación Bioquímica Nury Pérez Hernández Escuela Nacional de Medicina y Homeopatía, IPN Part II – rDG/DDD Analysis: From NMR Data to Molecular Structure	025
P13	Roberto Gil Department of Chemistry Carnegie Mellon University, EEUU	026
P14	Estructura de proteínas Federico del Río Portilla Instituto de Química, UNAM	027

FENÓMENOS DE HIPERPOLARIZACIÓN

Isaac F. Céspedes Camacho

Tecnológico de Costa Rica, Escuela de Química, Campus Tecnológico Central, 30101 Cartago,
Costa Rica, +506 2550 2782, icespedes@tec.ac.cr

Palabras clave: hiperpolarización, estados de no-equilibrio, optical nuclear polarization

Resumen. La Resonancia Magnética Nuclear (RMN) es una de las técnicas más utilizadas para la identificación y caracterización de compuestos orgánicos gracias a su versatilidad para identificar distintos núcleos, particularmente ¹H y ¹³C. No obstante, la técnica presenta una muy baja sensibilidad inherente a las interacciones débiles entre los espines nucleares y el campo magnético aplicado. Esto genera que algunos pocos espines estén activos (Boltzmann). La baja sensibilidad de la RMN implica largos tiempos de medición, sobre todo para núcleos con baja abundancia natural, con señales poco resueltas y difíciles de analizar. El problema puede corregirse parcialmente realizando experimentos a baja temperatura o aumentando el campo magnético. Estas variaciones implican un costo económico significativo que no siempre genera los resultados esperados, con polarizaciones en el orden de 10⁻⁴. (1)

Un método con el cual se puede mejorar la sensibilidad de la RMN son los fenómenos de hiperpolarización, en los cuales se fuerza al sistema de espines a un estado de no equilibrio (no-Boltzmann), obteniendo incrementos de entre 4 y 5 órdenes de magnitud, con señales de RMN más intensas y una alta relación señal-ruido. Aunque su naturaleza es inherentemente transitoria y muy dependiente de los fenómenos de relajación, los resultados obtenidos son satisfactorios. (2)

Los fenómenos de hiperpolarización varían dependiendo la fuente que genera el estado de no equilibrio, las cuales pueden ser fotones circularmente polarizados (luz), microondas o sustancias radicalarias. (3)

Dentro de los fenómenos de hiperpolarización más conocidos están el Overhauser-Dynamic Nuclear Polarization (O-DNP), el para-Hydrogen Induced Polarization (PHIP), el Optical Pumping o el Chemically Induced Dynamic Nuclear Polarization (CIDNP), en los cuales es posible obtener incrementos muy significativos en las señales de RMN. (4)

Esta conferencia busca mostrar los fundamentos teóricos básicos de los fenómenos de hiperpolarización, hardware asociado y aplicaciones prácticas en la ciencia y la tecnología actuales de algunos de estos fenómenos, particularmente O-DNP, PHIP y CIDNP, a partir de resultados experimentales, simulaciones y estudio bibliográfico de fuentes actuales.

Matysik (Universität Leipzig, Alemania) por su colaboración para el desarrollo de muchos de los experimentos presentados en esta charla.

Referencias.

1. E. Moser, E. Leistler, F. Schmitt, G. Kontaxis, *Front. Physics*. 2017, **5**, 33.
2. J. Eills, D. Butker, S. Cavagnero, S. J. Elliott, S. Jannin, A. Lesage, J. Matysik, T. Meersmann, T. Prisner, J. A. Reimer, H. Yang, I. V. Koptyug, *Chem. Rev.* 2023, **123**, 1417-1551.
3. M. H. Levitt, C. Bengs, *Magn. Reson.* 2021, **2**, 395-407.
4. *Hyperpolarization Methods in NMR Spectroscopy*, ed. L. T. Kuhn, Springer, Heidelberg, 1st edn., 2013.

Agradecimientos. Se agradece a la Escuela de Química del Tecnológico de Costa Rica por el apoyo para asistir al evento, así como a los miembros del Grupo de Investigación en RMN e Hiperpolarización. Un agradecimiento especial al Prof. Jörg

COCRISTALES TERMOSALIENTES

Braulio Rodríguez-Molina

Instituto de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, Circuito Exterior s/n, Circuito de la Investigación Científica, C.U., 04510 Coyoacán, Ciudad de México, México.
Teléfono: +(52) 55 56 22 44 05. Correo electrónico: brodriguez@iquimica.unam.mx.

Palabras clave: Rayos X, Resonancia Magnética Nuclear de Estado Sólido.

Resumen. Los materiales en los cuales las moléculas se “adaptan” tras la aplicación de estímulo externo que lleven al material a un estado energético distinto son conocidos como adaptronics materials; por lo tanto, una de las respuestas a estímulos es liberar energía de forma mecánica ya sea de forma reversible o irreversible.

En los cristales moleculares, los estímulos fisicoquímicos tales como calor, radiación UV-visible, estrés mecánico, cambio de acidez (pH), causan una respuesta de las moléculas dentro del cristal, liberando energía, observándose macroscópicamente. Este fenómeno se conoce como efecto saliente, el cual se presenta en cristales como fragmentaciones o agrietamiento del cristal.

Los cocristales son materiales que contienen dos o más moléculas distintas, sólidas a temperatura ambiente de forma individual, con una estequiometría definida dentro de la estructura cristalina. La ventaja de los cocristales es que poseen las propiedades fisicoquímicas de los materiales individuales, así como la obtención de nuevas propiedades como efectos salientes (1).

En esta plática, se discutirá la preparación y caracterización por RMN de sólidos de nuevos materiales cristalinos a partir de las moléculas de indolo[3,2-a]carbazol (ICZ) que presentan saltos al calentarse, dependiendo del disolvente con el que se haya llevado a cabo la cocristalización (2-5).

Agradecimientos. Agradezco el financiamiento DGPA PAPIIT IN212625. Agradezco también a la Dra. Martha Elena García Aguilera y a los estudiantes Dayra Barreto Hernández y Ernesto Ángel Hernández Morales por su colaboración.

Referencias.

1. A. Navarro-Huerta, M. E. García-Aguilera, J. Blahut, E. Bartůňková, R. A. Toscano, M. Rodríguez, M. Dračínský and B. Rodríguez-Molina, *Chemistry – A European Journal*, DOI:10.1002/chem.202501275.
2. R. K. Harris, J. Kowalewski, S. Cabral de Menezes, *Magn. Reson. Chem.* 1998, **36**, 145-149.
3. J. Keeler, *Understanding NMR Spectroscopy*, Wiley, Chichester, England, 2006, pp 429-431.
4. Wiley Analytical Science Magazine, NMR spectroscopy, <https://analyticalscience.wiley.com/topic/browse/nuclear-magnetic-resonance-spectroscopy> (revisado: julio 1, 2022).
5. G. F. Pauli, G. J. Ray, A. Bzhelyansky, B. U. Jaki, C. Corbett, C. Szabo, C. Setinbeck, D. Sørensen, D. Jeannerat, D. Ferreira, D. C. Lankin, J. B. McAlpine, J-N. Dumez, J. Bisson, K. Krishnamurthy, M. Niemitz, M. A. Nelson, P. Giraudieuau, S-P. Korhonen, S. Kuhn, T. Miura, L. Botros, 2001, <https://doi.org/10.26434/chemrxiv-2021-l3dhr>.

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE DERIVADOS FLUORESCENTES DEL BENCIMIDAZOL Y EL ANHÍDRIDO NAFTÁLICO

Oscar García-Barradas

Instituto de Química Aplicada, Universidad Veracruzana, Luis Castelazo Ayala s/n, Col. Industrial ánimas, 91190, Xalapa, Veracruz, 228 8418916, osgarcia@uv.mx.

Palabras clave: fluorescencia, aminoácidos, bencimidazol.

Resumen. Las sondas fluorescentes han sido objeto de gran interés en medicina diagnóstica, como herramientas teragnósticas, biomarcadores, en bioimagen en tiempo real, tinción celular, cirugías guiadas, etc., en la industria alimentaria y en las ciencias ambientales.^{1,2} Su principal atractivo radica en que la señal fluorescente proporciona una respuesta rápida y altamente sensible, lo que permite a su vez una detección altamente selectiva.³ Las técnicas basadas en fluorescencia también se caracterizan por la simplicidad en su operación, bajo costo y capacidad de monitoreo en tiempo real.⁴ Estructuralmente, las sondas fluorescentes constan de tres componentes: un fluoróforo, un espaciador y un núcleo de reconocimiento, y se definen como moléculas capaces de modificar su emisión de fluorescencia en respuesta a un evento de unión, una reacción química o un cambio en su entorno.⁵ En este trabajo se presenta la síntesis de una serie homóloga de derivados de anhídrido naftálico y bencimidazol, unidos a través de espaciadores de distinta longitud (Figura 1), los cuales fueron caracterizados por RMN, y se evaluaron sus propiedades fotofísicas con el objetivo de visualizar su aplicación como posibles sondas fluorescentes para el reconocimiento iónico o biomolecular. En la Figura 1 se muestra el esquema de síntesis empleado para la obtención de los derivados de interés.

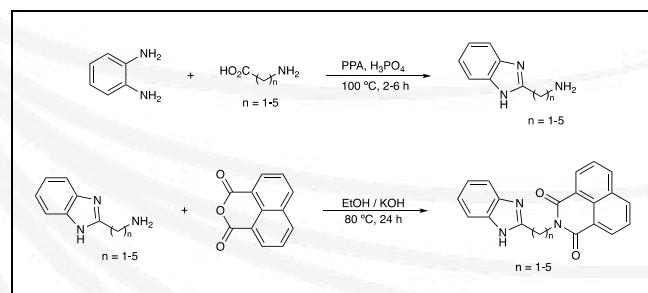
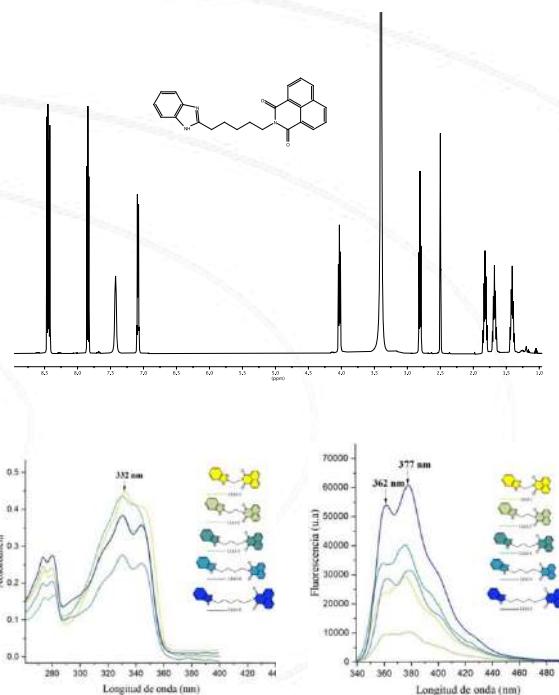


Figura 1. Esquema de síntesis de los derivados deseados.

Tabla 1. Rendimientos obtenidos para los intermediarios y los derivados deseados.

#C Cadena	Int (%rdt)	Derivado (%rdt)
1	74	31
2	83	28
3	72	36
4	89	56
5	64	82

La caracterización estructural de los derivados se realizó mediante RMN de ¹H, ¹³C y experimentos de 2D, y la determinación de las propiedades fotofísicas se realizó mediante espectroscopía UV/Vis y de fluorescencia. Se realizaron estudios de reconocimiento con diversas moléculas, lo que permite destacar el potencial de las moléculas obtenidas para el desarrollo de sensores de fluorescencia.



Agradecimientos. A la SECIHTI por la beca de maestría otorgada a la estudiante Leticia I. Alvarado Jiménez.

Referencias.

1. X. Wang, Q. Ding, R. R. Groleau, L. Wu, Y. Mao, F. Che, O. Kotova, E. M. Scanlan, S. E. Lewis, P. Li, B. Tang, T. D. James, T. Gunnlaugsson, *Chem. Rev.* 2024, **124**, 7106-7164.
2. N. Duan, H. Wang, Y. Li, S. Yang, H. Tian, B. Sun, *Coord. Chem. Rev.* 2021, **427**, 213557.
3. N. I. Georgiev, V. V. Bakov, K. K. Anichina, V. B. Bojinov, *Pharmaceuticals*, 2023, **16**, 381.
4. Y. C. Wu, J. Y. You, K. Jiang, H. Q. Wu, J. F. Xiong, Z. Y. Wang, *Dyes and Pigments*, 2018, **149**, 1-7.
5. Y. Fu, N. S. Finney, *RSC Advances*, 2018, **8**, 29051-29061.

BIOLOGÍA ESTRUCTURAL Y RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR

David Flores Solis

Protein structure determination using NMR. Max Planck Institute, Germany.

Palabras clave: RMN, estructura de proteínas, biología estructural.

Resumen. La biología estructural es una amalgama de técnicas y disciplinas para el estudio de la organización celular a nivel molecular. En el caso de las proteínas, la resonancia magnética nuclear (RMN) permite el acceso a información a nivel atómico y notablemente a parámetros dinámicos cercanos a condiciones fisiológicas *in vitro*. En esta plática se han recopilado algunos ejemplos de la relevancia de la RMN en biología estructural.

Actualmente, con el desarrollo continuo de rutinas computacionales para el diseño nuevos complejos proteicos, el uso racional de las herramientas computacionales toma cada día más relevancia. Recientemente, Z. Cheng y D. Baker han demostrado el uso del programa *Rosetta* para la selección y posterior producción de complejos proteicos *de novo* (1). La estrategia reduce el espacio conformacional de algunos aminoácidos y promueve interacciones específicas para la formación de heterodímeros. Parte de la confirmación experimental se realiza por RMN utilizando una nueva metodología de asignación que involucra espectros 4D y muestreo no uniforme (NUS por sus siglas en inglés).

Un ejemplo adicional del uso de RMN en biología estructural se puede observar en la plasticidad del complejo de histocompatibilidad clase I al interaccionar con el péptido RAS Q61 formando un nuevo epítopo. Aquí se demuestran interacciones específicas utilizando una estrategia de marcado isotópico ampliada y la medición de un conjunto de experimentos SOFAST. Con todo lo anterior, el trabajo contribuye a la comprensión de algunos marcadores moleculares provenientes de células cancerosas que permanecen elusivos al sistema inmune (2).

Por otro lado, el procesamiento de metabolitos es crucial para el funcionamiento celular y su caracterización molecular es relevante para la identificación de patologías provenientes de mutaciones puntuales. La información molecular que se puede extraer por RMN incluye a la regulación de canales que regulan la respuesta sináptica. Yu y colaboradores demostraron un encorvamiento de las vesículas sinápticas cuando la sinaptogirina entra en contacto la fosfatidilserina. Finalmente, la separación de fases líquido-líquido abre un nuevo paradigma para la transcripción a nivel molecular. Actualmente, los organelos libres de membrana permite plantear nuevas hipótesis sobre el procesamiento de la información contenida en el ADN. En este trabajo se describen por RMN las interacciones claves que permiten a la ARN-Pol II particionar e interaccionar con otros elementos claves durante la transcripción (3).

Referencias.

1. J. L. Watson, D. Juergens, N. R. Bennett, ..., D. Baker. *Nature* 2023, **620**, 1089–1100 (2023).
2. A. C. McShan, D. Flores-Solis, Y. Sun, S. E. Garfinkle, J. S. Toor, M. C. Young, N. G. Sgourakis. *Nat. Commun.* 2023, **14**, 8204.
3. D. Flores-Solis, I. P. Lushpinskaia, A. A. Polyansky, A. Changiarath, M. Boehning, M. Mirkovic, J. Walshe, L. M. Pietrek, P. Cramer, L. S. Stelzl, B. Zagrovic & M. Zweckstetter. *Nat. Commun.* 2023, **14**, 5979.

APPLICATION OF ConArch⁺ (CONFIGURATIONAL AND CONFORMATIONAL ARCHITECT) TO THE 3D STRUCTURE ANALYSIS OF SMALL MOLECULES – Part I

Roberto R. Gil

Department of Chemistry, Carnegie Mellon University, 4440 Fifth Avenue, Pittsburgh, PA 15213,
USA
+1 412-268-4313, rgil@andrew.cmu.edu

Palabras clave: NMR, residual dipolar couplings, molecular geometry.

Abstract. ConArch⁺ is a powerful and comprehensive structure elucidation tool that integrates isotropic and anisotropic multi-NMR parameters for the configurational and conformational analysis of small molecules. Developed at the Technical University of Darmstadt (Germany) by Professors Stefan Immel and Michael Reggelin, (1–10) the program runs on the LINUX operating system as a lightweight, fast, command-line–driven 64-bit application. It is designed for the calculation and analysis of NMR-derived residual dipolar couplings (RDCs), residual quadrupolar couplings (RQCs), and residual chemical shift anisotropies (RCSAs).

The software offers flexible options for multi-conformer-single-tensor (MCST) or multi-conformer–multi-tensor (MCMT) fitting. It includes detailed Monte Carlo error analysis for RDCs, RQCs, and RCSAs, along with numerous features for automated data visualization (e.g., D^{calc} vs. D^{exp} plots) and ray-tracing–quality rendering of probability and alignment tensors.

These same procedures can be applied to isotropic parameters, including chemical shifts, scalar coupling constants ($^nJ_{XY}$), and accurate NOE-derived distances using a reference-free NOE protocol. ConArch⁺ also supports the import of calculated NMR parameters from Gaussian and ORCA.

Part I – Fitting NMR Data to Structure:

- Brief introduction to the ConArch⁺ software.
- Overview of the ConArch⁺ input file format, which supports a wide range of NMR parameters including $^nJ_{XY}$, $^3J_{HH}$, chemical shifts, NOE/ROE, RDCs, RCSAs, and RQCs.
- Conversion of atom indices to atom labels, enabling a more intuitive and user-friendly interpretation of results.
- Demonstration of how individual or combined NMR parameters can be fitted to:
 - (a) a single structure,
 - (b) a complete set of diastereoisomers, or
 - (c) a conformational ensemble.

Acknowledges. The author thank contributions of Stefan Immel from the Department of Chemistry, Carnegie Mellon University, Pittsburgh, PA, USA, and Michael Reggelin from the Clemens-Schöpf-Institut für Organische Chemie und Biochemie, Technische Universität Darmstadt, Darmstadt, Germany.

References.

1. https://www.chemie.tu-darmstadt.de/reggelin/der_arbeitskreis_reggelin/conarch_plus/index.en.jsp
2. P. Berdagué, B. Gouilleux, M. Noll, S. Immel, M. Reggelin, P. Lesot, "Study and quantification of the enantiodiscrimination power of four polymeric chiral LLCs using NAD 2D-NMR", *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2022**, *24*, 7338–7348.
3. S. Immel, M. Köck, M. Reggelin, "NMR-Based Configurational Assignments of Natural Products: How Floating Chirality Distance Geometry Calculations Simplify Gambling with 2N-1 Diastereomers", *J. Nat. Prod.* **2022**, *85*, 1837–1849.
4. S. Immel, M. Köck, M. Reggelin, "Bayesian Inference Applied to NMR-Based Configurational Assignments by Floating Chirality Distance Geometry Calculations", *J. Am. Chem. Soc.* **2022**, *144*, 6830–6838.
5. M. Reggelin, S. Immel, "Configurational Analysis by Residual Dipolar Couplings: Critical Assessment of "Structural Noise" from Thermal Vibrations", *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, *60*, 3412–3416.
6. M. Köck, M. Reggelin, S. Immel, "Model-Free Approach for the Configurational Analysis of Marine Natural Products", *Marine Drugs* **2021**, *19*.
7. M. Köck, M. Reggelin, S. Immel, "The Advanced Floating Chirality Distance Geometry Approach—How Anisotropic NMR Parameters Can Support the Determination of the Relative Configuration of Natural Products", *Marine Drugs* **2020**, *18*.
8. S. Immel, M. Köck, M. Reggelin, "Configurational analysis by residual dipolar couplings: A critical assessment of diastereomeric differentiabilities", *Chirality* **2019**, *31*, 384–400.
9. S. Immel, M. Köck, M. Reggelin, "Configurational Analysis by Residual Dipolar Coupling Driven Floating Chirality Distance Geometry Calculations", *Chem. Eur. J.* **2018**, *24*, 13918–13930.
10. D. F. Mierke, M. Reggelin, "Simultaneous Determination of Conformation and Configuration Using Distance Geometry", *J. Org. Chem.* **1992**, *57*, 6365–6367.

APLICACIONES DE LA RMN EN LA SOLUCIÓN DE PROBLEMAS AGROFORESTALES DE IMPORTANCIA ECONÓMICA

José Luis Olivares Romero

Red de Estudios Moleculares Avanzados Edificio B, Campus III, Instituto de Ecología A. C.,
Carretera antigua a Coatepec 351, Col. El Haya, Xalapa, Veracruz, C.P. 91073, +52 (228) 842 1800
ext. 3511, jose.olivares@inecol.mx

Palabras clave: RMN, síntesis orgánica, compuestos bioactivos.

Resumen. La Resonancia Magnética Nuclear (RMN) se ha consolidado como una herramienta esencial en la elucidación estructural de compuestos bioactivos de interés agroforestal. En este contexto, en los últimos años, nuestro grupo de investigación ha desarrollado nuevas estrategias de síntesis asimétrica de insecticidas quirales, con especial énfasis en análogos neonicotínicos derivados de L- y D-prolina. Estos estudios han mostrado que la configuración absoluta influye de manera determinante en la actividad insecticida, destacando los enantiómeros *R* como los más potentes frente a plagas agrícolas. Mediante estudios de docking se confirmó la correlación entre quiralidad y afinidad por receptores nicotínicos de acetilcolina, aportando criterios útiles para el diseño racional de agroquímicos más selectivos. De manera complementaria, se desarrollaron nuevas rutas catalíticas para la síntesis enantioselectiva de la feromona de marcaje de *Anastrepha ludens*, empleando complejos de iridio y ligandos P,N, lo que representa un avance relevante en el diseño de herramientas semioquímicas para el control de moscas de la fruta. Paralelamente, se ha profundizado en la biología y manejo de plagas de importancia en huertos tropicales, como los escarabajos ambrosiales del género *Xyleborus*, reconocidos vectores de patógenos devastadores en aguacate, café y frutales. La revisión integral de su impacto y de las estrategias de control evidencia la urgencia de nuevas herramientas sostenibles para la protección de cultivos. En este contexto, tanto los insecticidas enantiopuros como los compuestos semioquímicos derivados de síntesis asimétrica se perfilan como alternativas estratégicas en programas de manejo integrado, contribuyendo a incrementar la productividad y competitividad de huertos de alto valor económico. (1-6).

Agradecimientos. Se agradece a la Secretaría de Ciencia, Humanidades, Tecnología e Innovación (SECIHTI) por el recurso otorgado a través de la convocatoria de Ciencia Básica y de Frontera 2025, mediante el proyecto CBF-2025-I-246.

Referencias.

1. Luna-Hernández, S. A.; Bonilla-Landa, I.; Reyes-Luna, A.; Rodríguez-Hernández, A.; Cuapio-Muñoz, U.; Ibarra-Juárez, L. A.; Suárez-Méndez, G.; Barrera-Méndez, F.; Pérez-Landa, I. D.; Enríquez-Medrano, F. J.; Díaz de León-Gómez, R. E.; Olivares-Romero, J. L. Synthesis and Insecticidal Evaluation of Chiral Neonicotinoids Analogs: The Laurel Wilt Case. *Molecules* **2021**, *26*, 4225.
2. Bonilla-Landa, I.; Cuapio-Muñoz, U.; Luna-Hernández, A.; Reyes-Luna, A.; Rodríguez-Hernández, A.; Ibarra-Juárez, A.; Suárez-Méndez, G.; Barrera-Méndez, F.; Caram-Salas, N.; Enríquez-Medrano, J. F.; Díaz de León, R. E.; Olivares-Romero, J. L. L-Proline as a Valuable Scaffold for the Synthesis of Novel Enantiopure Neonicotinoids Analogs. *J. Agric. Food Chem.* **2021**, *69*, 1455–1465.
3. Pawar, T. J.; Barcelona-Cazanave, L.; Bonilla-Landa, I.; Escobar, M.; Jimenez-Halla, J. O. C.; Altúzar-Molina, A.; Romero-Arellano, P.; Edmunds, A. J. F.; Aluja, M.; Olivares-Romero, J. L. New Synthetic Pathways to the *Anastrepha ludens* Host Marking Pheromone: Harnessing Iridium-Catalysis with Novel P,N-Ligand for Enantioselective Construction. *Org. Chem. Front.* **2023**, *10*, 4827–4835.
4. Rodríguez-Hernández, A.; Bonilla-Landa, I.; Vidal-Limon, A.; Ibarra-Juárez, A.; Barrera-Méndez, F.; Enríquez-Medrano, F. J.; Díaz de León, R. E.; Olivares-Romero, J. L. Synthesis, Insecticidal Activity, and Ensembled Docking of Nitroguanidines Bearing S- and R-Proline. *Pest Manag. Sci.* **2023**, *79*, 1912–1921.
5. Rodríguez-Becerra, S. H.; Vázquez-Rivera, R.; Ventura-Hernández, K. I.; Pawar, T. J.; Olivares-Romero, J. L. The Biology, Impact, and Management of *Xyleborus* Beetles: A Comprehensive Review. *Insects* **2024**, *15*, 706.
6. Ventura-Hernández, K. I.; Delgado-Alvarado, E.; Pawar, T. J.; Olivares-Romero, J. L. Chirality in Insecticide Design and Efficacy. *J. Agric. Food Chem.* **2024**, *72*, 20722–20737.

ANÁLISIS COMPLETO DE ESPINES DE METABOLITOS CON ESTRUCTURAS POCO COMUNES

Dra. Verónica Mayela Rivas Galindo

Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Medicina, Depto. Química Analítica, Av. Madero s/n, Colonia Mitrás Centro, CP 64460, teléfono 8183294185,
veronica.rivasgl@uanl.edu.mx

Palabras clave: *Jatropha dioica*, HiFSA, tablas de correlación QuILTs

Resumen. En nuestra búsqueda de nuevas moléculas bioactivas a partir de plantas mexicanas, se han obtenido varios diterpenoides de estructuras poco comunes a partir de la raíz de *Jatropha dioica* (1, 2, 3). Uno de éstos tiene esqueleto de riolozano, dos con esqueleto de ciclojatروفano y dos más con un esqueleto nuevo de tipo *seco*-riolozano (Figura 1). Para abordar el análisis estructural de cada diterpenoide, se hizo en primera instancia la asignación inequívoca de cada señal de hidrógeno y de carbono mediante RMN de una y dos dimensiones. Posteriormente, se llevó a cabo un análisis completo de espines de ¹H (HiFSA, por sus siglas en inglés), produciendo mapas de correlación completa de constantes de acoplamiento, que se representaron como tablas de interacción y enlace cuántico (QuILTs, por sus siglas en inglés). Con todos los datos de desplazamiento químico, de integración de señales y de valores de constantes de acoplamiento, se hizo un análisis de consistencia (ACA) con la simulación de espectros de ¹H-RMN. Finalmente, se determinó la configuración absoluta de todos los compuestos por medio de cristalografía de Rayos X y Dicroismo Circular Vibracional.

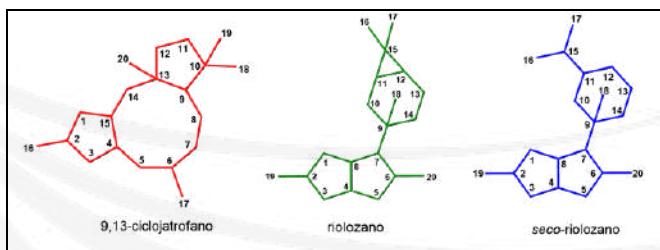


Figura 1. Tipos estructurales de diterpenoides aislados de la raíz de *Jatropha dioica*.

En el caso de los compuestos con esqueleto de tipo riolozano y *seco*-riolozano, el análisis estructural se hizo con los compuestos puros. El diterpenoide 6-*epi*-riolozatriona, es el segundo compuesto reportado con esqueleto de riolozano (3). El análisis completo de espines fue particularmente complicado, ya que en este tipo estructural se observaron acoplamientos de hidrógeno hasta 6 enlaces de distancia. Referente a los compuestos con esqueleto de *seco*-riolozano, se aisló el 10-15-peroxi-*seco*-riolozano, es un diterpenoide con un peróxido en su estructura, lo que dificultó un poco su obtención y análisis por su inestabilidad.

También se obtuvo el 11-15-epoxi-*seco*-riolozano, que como su nombre lo dice, tiene en su estructura un epóxido. Al igual que la 6-*epi*-riolozatriona, se observaron acoplamientos de hidrógeno hasta 6 enlaces en ambos *seco*-riolozanos. El esqueleto de estos compuestos no se había reportado antes, y en honor al Dr. Xorge A. Domínguez, quién fue el descubridor de riolozatriona, se decidió continuar con su nomenclatura y nombrarlos como peroxi-xorgesecoriolozadione y epoxi-xorgesecoriolozatrione (4).

Respecto a los diterpenoides con esqueleto de tipo ciclojatروفano, éstos son isómeros del diterpenoide Jatروفatriona y se obtuvieron en mezcla cristalina de proporción 2 a 3. El análisis se espines por RMN fue complicado debido al solapamiento de señales, sin embargo, se utilizó el TOCSY selectivo lo que permitió obtener el valor de desplazamiento químico exacto de cada señal de H y verificar la multiplicidad. Además, del análisis por cristalografía de Rayos X de la mezcla de ambos isómeros, se obtuvieron las conformaciones espaciales de ambos compuestos, lo que ayudó a proyectar valores aproximados de constantes de acoplamiento de hidrógeno. Uno de los isómeros fue recientemente reportado de la planta *Jatropha gossypiifolia*, por lo que su nombre es Jatrogossona H (5). El otro isómero no ha sido reportado en la literatura y se le nombró como iso-Jatروفatriona A.

Agradecimientos. Se agradece el apoyo otorgado por el CONACYT a través del proyecto financiado Ciencia Básica CB-2015-01 252589.

Referencias.

1. X. A. Domínguez, G. Cano, R. Franco, A. M. Villarreal, W. H. Watson, V. Zabel, *Phytochemistry* 1980, **19**, 2478.
2. J. Yang, Y. O. Long, L. A. Paquette, *J. Am. Chem. Soc.* 2003, **125**, 1567-1574.
3. E. M. Melchor-Martínez, D. A. Silva-Mares, E. Torres-López, N. Waksman-Minsky, G. F. Pauli, S. N. Chen, G. Cuevas, V. M. Rivas-Galindo, *J. Nat. Prod.* 2017, **80**, 2252-2262.
4. E. M. Melchor-Martínez, J. F. Tamez-Fernández, D. A. Silva-Mares, E. Torres-López, N. Waksman-Minsky, H. Loa-Martínez, T. R. Ibarra-Rivera, A. L. Saucedo-Yáñez, G. F. Pauli, Matthias Niemitz, R. A. Toscano, G. Cuevas, V. M. Rivas-Galindo, *J. Nat. Prod.* 2025, Manuscrito en preparación.
5. C. Y. Zhang, L. J. Zhang, Z. C. Lu, C. Y. Ma, K. Rahman, H. Zhang, J. Y. Zhu, *J. Nat. Prod.* 2018, **81**, 1701-1710.

OTROS FENÓMENOS DE HIPERPOLARIZACIÓN Y SUS APLICACIONES: photo-CIDNP Y ^{129}Xe HP

Isaac F. Céspedes Camacho

Tecnológico de Costa Rica, Escuela de Química, Campus Tecnológico Central, 30101 Cartago,
Costa Rica, +506 2550 2782, icespedes@tec.ac.cr

Palabras clave: hiperpolarización, photo-CIDNP, ^{129}Xe hiperpolarizado

Resumen. Quizás el problema más grande que tiene la técnica de Resonancia Magnética Nuclear (RMN) es su baja sensibilidad, no sólo por la baja abundancia natural de algunos isótopos sino también por la débil interacción de los espines con el campo magnético aplicado. Aunque es posible resolver este inconveniente con la temperatura o la fuerza del campo magnético, los mejores incrementos en la señal se logran gracias a los fenómenos de hiperpolarización.

La hiperpolarización se fundamenta en la generación de espines nucleares fuera del estado de equilibrio y que no siguen las leyes de Boltzmann.

Dos de estos fenómenos son el photo-Chemically Induced Dynamic Nuclear Polarization (photo-CIDNP) y el ^{129}Xe hiperpolarizado (HP). A partir de radiación de luz con una cierta longitud de onda se crea un estado de alta polarización que, a partir de tres mecanismos diferenciados, crea un incremento significativo en los espectros correspondientes. (1) Aunque el efecto se ha observado en estado líquido, su desarrollo en muestras sólidas ha aumentado en los últimos años, sobre todo al estudiar organismos fotosintéticos. Se ha considerado que el efecto photo-CIDNP es una propiedad intrínseca de los sistemas fotosintéticos estudiados a la fecha. Según la teoría, es posible obtener altos incrementos de señales en campos magnéticos bajos y ultra bajos, aunque los resultados experimentales aún están bajo estudio. (2)

Es posible obtener información referente a distribución de densidad electrónica de espines o dinámica de procesos con ayuda de experimentos photo-CIDNP. (3)

En cuanto al ^{129}Xe HP, núcleo cuadrupolar con una gran nube electrónica polarizable, el fenómeno puede utilizarse para estudiar ambientes químicos de materiales porosos. Lo anterior gracias a la sensibilidad del Xe a cambios en sus alrededores químicos. El fenómeno inicia con la polarización óptica de metales alcalinos que se transfiere al Xe. (4)

Los fenómenos de ^{129}Xe HP se han utilizado en nuestro grupo de investigación para estudiar muestras de diatomitas silicadas, aerogeles hidrofóbicos de sílice e interacciones entre estos y enzimas degradadoras de plástico.

Esta presentación muestra la teoría, equipo, condiciones y ejemplos prácticos del efecto photo-CIDNP y del ^{129}Xe HP. Para el primero de ellos se muestran resultados y aplicaciones en organismos fotosintéticos, mientras que para el segundo se presentan sus aplicaciones en la ciencia e ingeniería de los materiales. (5)

Agradecimientos. Se agradece a la Escuela de Química del Tecnológico de Costa Rica por el apoyo para asistir al evento, así como a los miembros del Grupo de Investigación en RMN e Hiperpolarización. Un agradecimiento especial al Prof. Jörg Matysik (Universität Leipzig, Alemania) por su colaboración para el desarrollo de muchos de los experimentos presentados en esta charla.

Referencias.

1. S. Prakash, H. J. M de Groot, J. Matysik, G. Jeschke, *J. Am. Chem. Soc.* 2006, **128**, 12794.
2. G. Jeschke, B. C. Anger, B. E. Bode, J. Matysik, *J. Phys. Chem. A* 2011, **115**, 9919-9928.
3. I. F. Céspedes-Camacho, in *The Biophysics of photosynthesis*, ed. J. Golbeck and A. van der Est, Springer, Nueva York, 1a edn. 2014, cap 5, pp 141-170.
4. B. Fang, S. Xu, Y. Wei, Z. Liu, *Magn. Reson. Lett.* 2021, **1**, 11-27.
5. T. Alpízar-Rojas, J. D. Barboza-Carmona, E. Butenschön, E. Castellón-Elizondo, J. Matysik, I. F. Céspedes-Camacho, *Gels* 2025, **11**, 92.

EMPLEO DE EXPERIMENTOS DEL TIPO *pure shift* PARA LA IDENTIFICACIÓN DE METABOLITOS EN MUESTRAS CLÍNICAS

Dr. José Iván Serrano-Contreras

Imperial College London, Department of Metabolism, Digestion and Reproduction, Section of Nutrition, Faculty of Medicine, Commonwealth Building, Hammersmith Campus, Imperial College London, London W12 0NN, UK, j.serrano-contreras@imperial.ac.uk

Palabras clave: Pure shift, identificación de metabolitos, artefactos de acoplamiento fuerte, muestras gastrointestinales.

Resumen. La identificación de metabolitos es un cuello de botella en estudios del perfil metabolómico. En la actualidad existen protocolos para este propósito que incluyen herramientas analíticas y bioinformáticas. Dentro de las herramientas analíticas, y en el caso específico del empleo de la Resonancia Magnética Nuclear, hay una batería de experimentos homo- y heteronucleares de una y dos dimensiones que normalmente se emplean para identificar metabolitos en muestras complejas de manera rutinaria. Sin embargo, en la actualidad existen experimentos novedosos que aún no se han explorado y que poseen un gran potencial para identificar metabolitos. Tal es el caso de los experimentos del tipo *pure shift* (PS), que es una técnica que produce un pico único por cada multiplete espectral, lo que permite mejorar la resolución de los espectros de RMN. Dependiendo del tipo de identificación requerida, de la concentración del metabolito a identificar y, por ende, del tiempo de equipo requerido, se puede emplear la ventana espectral completa o solo una región o señal mediante el empleo de PS de la clase de banda ancha (BB-PS) o de banda selectiva (BS-PS), respectivamente. PSYCHE (BB-PS) y HOBS (BS-PS) fueron empleados para identificar metabolitos en muestras de orina, suero y gastrointestinales.

Una de las limitaciones de PS es de la presencia de artefactos derivados de acoplamientos fuertes, los cuales también se observan en los experimentos resueltos por *J* (*J*-Res) y que son característicos al tipo de spin en cuestión. No obstante, hemos demostrado que dichos artefactos nos dan información de conectividad y que son parte de la huella dactilar de los metabolitos que los producen, haciendo posible tomar ventaja de ellos para identificar metabolitos. A pesar de que ambos experimentos PS tienen beneficios y limitaciones, son técnicas complementarias con un gran potencial para identificar metabolitos en muestras clínicas, por lo que se pueden incluir rutinariamente en los protocolos para identificar metabolitos en estudios de perfil metabolómico.

Agradecimientos. El puesto de JISC fue financiado por National Institute for Health Research (NIHR) Imperial Biomedical Research Centre (BRC), y por Medical Research Council (MRC). Sin embargo, esta investigación fue realizada de manera independiente.

Referencias.

1. I. Garcia-Perez, J. M. Posma, J. I., Serrano-Contreras JI, *et al. Nat. Protoc.* 2020, **15**(8), 2538-2567.
2. J.I. Serrano-Contreras, J. C. Lindon, G. Frost, *et al. NMR Biomed.* 2024, **37**(3), e5060.
3. A. Dagbasi, C. Byrne, D. Blunt, *et al. Sci. Transl. Med.* 2024, **16**(752), eadm8132.
4. M. Cai, S. Tejpal, M. Tashkova, *et al. Nat. Metab.* 2025, **7**(7), 1459-1475.

DE MOLÉCULAS A METABOLOMAS: EL PODER DE LA RMN EN LA INVESTIGACIÓN BIOQUÍMICA

Nury Pérez Hernández

Sección de Estudios de Posgrado e Investigación. Escuela Nacional de Medicina y Homeopatía-IPN
Av. Guillermo Massieu Helguera 239, La Purísima Ticomán, Gustavo A. Madero, 07320, CDMX.
nperez@ipn.mx.

Palabras clave: RMN, metabolismo, bioquímica clínica.

Resumen. En las últimas décadas, el análisis de intermediarios metabólicos en muestras biológicas ha permitido comprender mejor los procesos fisiológicos. Entre las técnicas más utilizadas se encuentra la resonancia magnética nuclear (RMN) y aunque esta se ha empleado tradicionalmente para elucidar estructuras moleculares, su uso en el estudio de muestras biológicas se ha desarrollado como en la metabolomica. Además, la RMN es útil para la cuantificación de metabolitos (qNMR), el empleo de trazadores isotópicos para seguir el destino metabólico de fármacos o nutrientes, el descubrimiento de nuevas rutas metabólicas en procesos normales y patológicos, el análisis de flujos metabólicos y el estudio de interacciones metabolito-proteína, aspectos clave para la regulación bioquímica. Se pueden incluir figuras o tablas bajo el siguiente formato:

Complementariamente, el desarrollo paralelo de herramientas computacionales para automatizar el análisis espectral ha facilitado la obtención de información metabólica detallada. En esta charla se resumen las metodologías actuales de RMN en bioquímica de pequeñas moléculas y algunas aplicaciones realizadas por nuestro grupo de trabajo.

Agradecimientos. Deseable incluir aquí la fuente de financiamiento de la investigación o las becas o subvenciones recibidas o los nombres de los colaboradores.

Referencias.

- Las citas se escribirán en tamaño 9. Los ejemplos a continuación son para artículo, capítulo de libro y memorias de congreso o páginas web, respectivamente. Utilizar el formato de los ejemplos siguientes:
1. R. K. Harris, J. Kowalewski, S. Cabral de Menezes, *Magn. Reson. Chem.* 1998, **36**, 145-149.
 2. J. Keeler, *Understanding NMR Spectroscopy*, Wiley, Chichester, England, 2006, pp 429-431.
 3. Wiley Analytical Science Magazine, NMR spectroscopy, <https://analyticalscience.wiley.com/topic/browse/nuclear-magnetic-resonance-spectroscopy> (revisado: julio 1, 2022)
 4. G. F. Pauli, G. J. Ray, A. Bzhelyansky, B. U. Jaki, C. Corbett, C. Szabo, C. Setinbeck, D. Sørensen, D. Jeannerat, D. Ferreira, D. C. Lankin, J. B. McAlpine, J.-N. Dumez, J. Bisson, K. Krishnamurthy, M. Niemitz, M. A. Nelson, P. Giraudeau, S.-P. Korhonen, S. Kuhn, T. Miura, L. Botros, 2001, <https://doi.org/10.26434/chemrxiv-2021-l3dhr>.

APPLICATION OF ConArch⁺ (CONFIGURATIONAL AND CONFORMATIONAL ARCHITECT) TO THE 3D STRUCTURE ANALYSIS OF SMALL MOLECULES – Part II

Roberto R. Gil

Department of Chemistry, Carnegie Mellon University, 4440 Fifth Avenue, Pittsburgh, PA 15213,
USA
+1 412-268-4313, rgil@andrew.cmu.edu

Palabras clave: NMR, residual dipolar couplings, molecular geometry.

Abstract. ConArch⁺ is a powerful and comprehensive structure elucidation tool that integrates isotropic and anisotropic multi-NMR parameters for the configurational and conformational analysis of small molecules. It is designed for the calculation and analysis of NMR-derived residual dipolar couplings (RDCs), residual quadrupolar couplings (RQCs), and residual chemical shift anisotropies (RCSAs). ConArch⁺ also supports the import of calculated NMR parameters from Gaussian and ORCA (1).

While ConArch⁺ excels at fitting complex NMR datasets to molecular models, what truly sets it apart, and makes it a game-changer among structure elucidation tools, is its ability to solve the *inverse* problem: deducing 3D structure *directly* from experimental data. The floating chirality-restricted distance geometry and dynamics module (fc-rDG/DDD) bypasses conventional structure validation by offering a novel, data-driven path from constitution to configuration and conformation. An important aspect of the DG/DDD approach is that all structural models are first generated in a four-dimensional (4D) space [the 4D-trick] before being projected into real 3D space. In essence, the 4D space includes the conventional x,y,z atomic coordinates, plus a fourth dimension that enables the free-floating (floating chirality) of atomic configurations. Features such as the innovative “4D-trick”, (2-4) which elegantly reduces configurational interconversion in 3D to a rotation in 4D, make this approach a qualitative leap beyond traditional verification/falsification methods.

Part II – rDG/DDD Analysis: From NMR Data to Molecular Structure:

- Introduction to the concepts behind data-driven floating chirality-restricted distance geometry (fc-rDG) and distance-bounds-driven dynamics (fc-rDG/DDD). Explanation of the “4D-trick” for simplifying configurational assignment through systematic rotational analysis.
- Discussion of why this module represents a paradigm shift: solving the structure-from-data problem without needing to predefine candidate structures.

- Case studies illustrating how to determine the correct molecular configuration and preferred conformation(s) directly from molecular constitution, using reference-free NOE/ROE data and multi-alignment RDC datasets.

Acknowledges. The author thank contributions of Stefan Immel from the Department of Chemistry, Carnegie Mellon University, Pittsburgh, PA, USA, and Michael Reggelin from the Clemens-Schöpf-Institut für Organische Chemie und Biochemie, Technische Universität Darmstadt, Darmstadt, Germany.

References.

1. M.R.M. Koos, K.H.G. Schulz and R.R. Gil. “Reference-free NOE NMR analysis”, *Chem. Sci.* **2020**, 11, 9930-9936.
2. G. M. Crippen, *J. Comput. Chem.* **1982**, 3, 471-476.
3. T. F. Havel, *Prog. Biophys. molec. Biol.* **1991**, 56, 43-78.
4. G. M. Crippen, T. F. Havel, *Distance Geometry and Molecular Conformation*, John Wiley & Sons, **1988**.

ESTRUCTURA DE PROTEÍNAS

José Federico del Río Portilla

Instituto de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, Circuito Exterior s/n, Circuito de la Investigación Científica, C.U., 04510 Coyoacán, CdMx, (+52) 55 5622 4613, jfrp@unam.mx.

Palabras clave: RMN, tamapina, canales SK2.

Resumen. Las proteínas son las macromoléculas responsables en gran medida de la vida. Su función es tan variada como la vida misma. La estructura de una proteína es la responsable de su función. Estas proteínas pueden adoptar un gran número de conformaciones. Normalmente, la conformación más estable es la responsable de determinar la función de las proteínas. Por ello, determinar su estructura es fundamental para comprender su función. La estructura de una proteína tiene cuatro niveles: 1. La primaria, la cual se refiere a la secuencia iniciando normalmente por la región N terminal; 2. La secundaria está conformada por las conformaciones regidas por enlaces de hidrógeno y fuerzas electrostáticas fuertes, como las hebras beta, hélices alfa, etc.; 3. La terciaria, si bien están regidas por fuerzas similares a la secundaria como las de van der Wals y electrostáticas débiles, implica como las estructuras secundarias se acomodan en el espacio; 4. La cuaternaria es un arreglo en donde las proteínas que tienen una función particular requiere de varios arreglos proteicos para realizar la función; las proteínas que conforman este complejo, requieren de un conformación particular.

En nuestro afán de obtener las estructuras de toxinas de alacrán, se obtuvo la estructura de la tamapina, la cual bloquea los canales SK2 de manera particular (1). Recientemente, Vandier y su grupo encontró que la delección del gen SK3 inhibía la migración de células cancerígenas (2). Estudios realizados por Mayorga nos llevaron a descubrir que existe una proteína similar a la tamapina, la mutante E25KK27E, que puede bloquear los canales SK3 de igual forma que los canales SK2 (3). Resultados de migración mostraron que mientras la tamapina no inhibe la migración celular, la llamada doble mutante de la tamapina si inhibe la migración de estas células.

Mediante RMN hemos encontrado que las estructuras de las toxinas son muy similares; sin embargo, en las mutantes de la tamapina se han encontrado cambios en las actividades electrofisiológicas y de migración. Seguimos en la búsqueda para encontrar los motivos por los cuales estructuras similares donde se cambian uno o dos aminoácidos generan cambios significativos en la actividad biológica.

Agradecimientos. Proyecto PAPIIT IG200125.

Referencias.

1. P. Pedarzani, D. D'hoedt, K. B. Doorty, J. D. Wadsworth, J. S. Joseph, K. Jeyaseelan, R. M. Kini, S. V. Gadre, S. M. Sapatnekar, M. Stocker, P. N. Strong, *J. Biol. Chem.* 2002, **277**(48), 46101-46109.
2. A. Chantôme, M. Potier-Cartereau, S. Roger, C. Vandier, O Soriani, V. Joulin. Ion Channels as Promising Therapeutic Targets for Melanoma. Yohei Tanaka. *Breakthroughs in Melanoma Research*, InTech, 2011, pp.429-460,
3. M. Mayorga-Flores, A. Chantôme, C. Monserrath Melchor-Meneses, I. Domingo, G. Titaux-Delgado, R. Galindo-Murillo, C. Vandier, F. del Río-Portilla. *ACS Med. Chem. Lett.* 2020, **11**(8), 1627-1633.

Presentaciones *flash*

PRESENTACIONES FLASH

No. presentación	Nombre del trabajo y autores	No. página
F01	SINTESIS DE COMPLEJOS METÁLICOS DINUCLEARES DERIVADOS DE 1,2,3-TRIAZOL-5-ILIDENOS FUNCIONALIZADOS CON FLUORENO Emmanuel Campos Dominguez, Daniel Mendoza Espinosa	031
F02	Síntesis y caracterización de bromuros de piridinio derivados del acetato de colesterol José María Peña Martínez, Marta Elena Hernandez-Caballero, Joel L. Terán, Alan Carrasco Carballo	032
F03	TAUTOMERÍA NITROSO-OXIMA EN NITROSO PIRROLES Mónica Farfán Paredes, Ma. Eugenia Ochoa, Marco Leyva, Rosa Santillan	033
F04	EFFECTO REGENERATIVO DE ASTAXANTINA NANOEMULSIFICADA: PERFIL METABOLÓMICO POR RMN ¹H EN UN MODELO MURINO DE HEPATOTOXICIDAD Susana Bautista-Hernández, Socorro Herrera-Meza, Luz Alicia Pascual-Pineda, Alberto Sánchez-Medina	034
F05	DESARROLLO DE UN MÉTODO DE RMN PARA LA CUANTIFICACIÓN DE OCHRACEÓLIDA A. Nataly Arias-López, Jimmy Ceballos-Cruz, Gumersindo Mirón-López, Gonzalo Mena-Rejón	035
F06	Aislamiento y caracterización de psilocibina en <i>Psilocybe cubensis</i> del Estado de Hidalgo: avances en la investigación Aylín Rocío Tabal Robles, Leticia Romero Bautista, Susana Rojas Lima, María Eva González Trujano, Laura Guzmán Dávalos, J. J. Martín Torres Valencia	036
F07	BIOCONJUGADOS DERIVADOS DE HECOGENINA CON SALES DE PIRIDINIO MONO, DI Y TRI METIL-SUSTITUIDAS: SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN. Edwin Lara Cruz, Joel L. Terán, Maricruz Anaya Ruiz, Alan Carrasco Carballo	037
F08	ANÁLISIS ESPECTROSCÓPICO PARA LA CARACTERIZACIÓN DE LA RUTA DE SÍNTESIS DE LA ALLOPREGNANOLONA 17-HIDRAZINIL-2-OXOETILO PIRIDINA-1-ION BROMURO MEDIANTE RMN E IR. José Arturo Altamirano Espino, Natalia Reyes Vallejo, Fernando Rivera Sánchez, Catalina Soriano Correa, Adelfo Natalio Reyes Vallejo	038

PRESENTACIONES FLASH

No. presentación	Nombre del trabajo y autores	No. página
F09	SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE TRIPTOFANOATOS DE ALQUILO Roberto A. Galeana-Ascencio, Ramsés E. Ramírez Gutiérrez, Sandra Raquel Reyes-Carmona, Alberto Ramírez Mata, Alan Carrasco-Carballo	039
F10	RTA SINTETICA PARA LA OBTENCION DE BIOCONJUGADOS DE HIDROXIBENZOATOS DE HECOGENILO Juan Alex Hernández Rivera, Sandra Raquel Reyes Carmona, Alan Carrasco Carballo	040
F11	SÍNTESIS DE HIDROPERÓXIDOS DE PIRROLOISOINDOLONAS: LA RMN DE 1D Y 2D EN LA DIASTEREOSLECTIVIDAD DE LOS MECANISMOS DE REACCIÓN RADICALARIA. José Arturo Altamirano Espino, Natalia Reyes Vallejo, Fernando Rivera Sánchez, Catalina Soriano Correa, Adelfo Natalio Reyes Vallejo	041

SÍNTESIS DE COMPLEJOS METÁLICOS DINUCLEARES DERIVADOS DE 1,2,3-TRIAZOL-5-ILIDENOS FUNCIONALIZADOS CON FLUORENO.

Emmanuel Campos Dominguez,* Daniel Mendoza Espinosa

Área Académica de Química, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, Carretera Pachuca-Tulancingo Km. 4.5, Mineral de la Reforma, Hidalgo 42090, México. Tel. 7721264636,
emmanuelcampos0301@gmail.com, daniel_mendoza@uaeh.edu.mx

Palabras clave: carbeno mesoiónico, plata(I), paladio(II).

Introducción. Actualmente los carbenos N-heterocíclicos anormales (aNHC) también conocidos como carbenos mesoiónicos (MIC) han sido empleados por la alta estabilidad que confieren a los complejos metálicos respecto a sus predecesores clásicos (1). Por ello, se ha optado por la modificación estructural de moléculas para integrar dichos ligantes mediante técnicas de síntesis sencillas y accesibles (2). De tal forma que bloques estructurales que presentan pocas aplicaciones en este ámbito, como el fluoreno (3) permitirían la obtención de ligantes bidentados con propiedades interesantes que aún no han sido exploradas.

Objetivo. Diseñar, sintetizar y caracterizar nuevos complejos metálicos que integren carbenos mesoiónicos (MIC) derivados de fluoreno para su uso como precursores de catalizadores homogéneos.

Metodología. La síntesis del complejo metálico **2** se realizó mediante el tratamiento de la sal de bis-1,2,3-triazolio derivada de fluoreno **1** con óxido de plata haciendo uso de la metodología *in situ* para la formación del carbeno metálico. Por otra parte, el complejo metálico **3** fue obtenido a partir de la reacción de transmetalación del complejo **2** con el dímero del cloruro de alipaladio(II) (Figura 1). Se hizo uso de un espectrofotómetro Bruker Ascend 400 (400 MHz) para obtener los espectros de RMN de ¹H y ¹³C, así como de diagramas de correlación HSQC y HMBC para la correcta asignación de las señales en cada uno de los productos.

Resultados y discusión. Se obtuvieron los complejos metálicos **2** y **3** con rendimientos del 85 y 98%, respectivamente (Figura 1). Es importante destacar en los espectros de ¹H la ausencia de las señales correspondientes al grupo CH de triazolio observada entre 6.4 y 7 ppm en ambos compuestos debido a la formación del enlace carbono-metal. En el caso de **3**, la presencia de cinco nuevas señales correspondientes al fragmento alilo en el intervalo de 5.0-1.3 ppm son consistentes con su estructura. Por otra parte, en los espectros de ¹³C se observa la desprotección de las señales del carbono de la posición 2 ubicándose en 167.6 ppm para el complejo de plata(I) descrita como un par de señales dobles con el mismo desplazamiento que corresponden a los acoplamientos ¹³C con ¹⁰⁷Ag y ¹⁰⁹Ag; así mismo en 168.2 y 168.1 ppm para el complejo de paladio(II) como un par de señales simples debido a la simetría de la molécula. De igual

forma se pudo obtener la estructura de Rayos X de monocrystal del complejo **3**, la cual nos permite discutir acerca de la conformación que pueden adoptar los complejos metálicos en el estado sólido y como esta puede inferir en el comportamiento en solución.

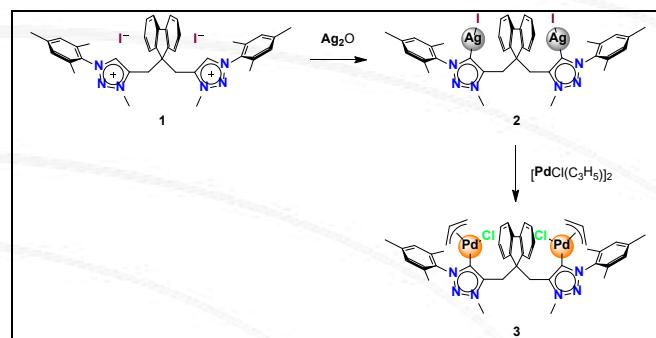


Figura 1. Ruta general para la síntesis de complejos metálicos derivados de bis-1,2,3-triazol-5-ilidenos.

Conclusiones. Se obtuvieron los productos **2** y **3** de manera satisfactoria, los cuales pudieron ser caracterizados estructuralmente mediante técnicas espectroscópicas de Resonancia Magnética Nuclear y Rayos X de monocrystal, además su análisis permitió justificar las conformaciones estructurales que pueden adoptar este tipo de moléculas. Se realizará un estudio de la actividad catalítica de dichos complejos en algunas reacciones orgánicas de interés.

Agradecimientos. Este trabajo se realizó en el Área Académica de Química de la Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, dirigido por el Dr. Daniel Mendoza Espinosa, desarrollado con una beca nacional de posgrado otorgada por la Secretaría de Ciencia, Humanidades, Tecnología e Innovación (SECIHTI).

Referencias.

1. J. G. Fonseca-Olvera, F. J. Ruiz-Mendoza, A. Flores-Ávila, M. Meléndez-Rodríguez, O. R. Suárez-Castillo and D. Mendoza-Espinosa, *Eur J Inorg Chem*, 2024, **27**, e202400145.
2. E. Campos-Dominguez, J. Vasquez-Perez, S. Rojas-Lima, H. Lopez-Ruiz and D. Mendoza-Espinosa, *Appl Organomet Chem*, 2021, **35**, e6098.
3. R. Rajesh, G. Periyasami, R. Raghunathan, *Tetrahedron Lett*, 2010, **51**, 1896–1898.

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE BROMUROS DE PIRIDINIO DERIVADOS DEL ACETATO DE COLESTEROL

José María Peña Martínez^{1*}, Marta Elena Hernandez-Caballero², Joel L. Terán³, Alan Carrasco Carballo¹

¹Laboratorio de Elucidación y Síntesis en Química Orgánica, Instituto de Ciencias, BUAP, México

²Biomedicina, Facultad de Medicina, BUAP, Puebla 72570

³Centro de Química, Instituto de Ciencias, BUAP, Puebla 72570

jose.penama@alumno.buap.mx

Palabras clave: Colesterol, síntesis, caracterización completa

Introducción. El colesterol es una materia prima esterooidal cuyo grupo funcional 3 β -hidroxilo ha demostrado ser un sitio estratégico para modificaciones químicas orientadas a la administración de fármacos y compuestos bioactivos (1, 2). Por otro lado, las sales de piridinio son reconocidas por sus múltiples aplicaciones en colorantes, cosméticos y la industria farmacéutica (3). Por lo tanto, la bioconjugación entre estructuras esteroideas y sales de piridinio puede unir sus propiedades individuales (4).

Objetivo. Caracterización espectroscópica por RMN de bromuros de piridinio derivadas del acetato de colesterol.

Metodología.

La síntesis se llevó a cabo de acuerdo a la figura 1.

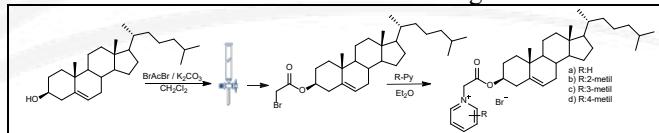


Figura 1. Síntesis de sales de bromuro de acetato de piridinio de colesterol.

Resultados y discusión.

El bromoacetato de colesterol (fig. 2, b) presenta una señal característica para CH_2-3'' como una señal simple en 3.81 ppm, aquí ocurre la modificación química, por lo tanto, se espera su desplazamiento químico. Las sales de bromuros de acetato de piridinio de colesterol, caracterizadas por el ion bromuro como contráion (fig. 2. c-f), muestran el desplazamiento químico de CH_2-3'' como una señal múltiple a 6.10 ppm, debido al efecto despolarizante de la carga positiva del nitrógeno cuaternario de la piridina que reduce la densidad electrónica en el entorno del metileno, en consecuencia, desprotegiendo al par de protones, aumentando su desplazamiento químico; asimismo, también se provoca el cambio en la multiplicidad a una más compleja. Estos bioconjugados también cuentan con señales correspondientes a la piridina (Py2-Py6) cuyo desplazamiento es de acuerdo con su cercanía al nitrógeno cuaternario y a la nueva señal del grupo metilo, según la piridina sustituida utilizada (2MPy, 3MPy y 4MPy), caracterizada por ser una señal simple.

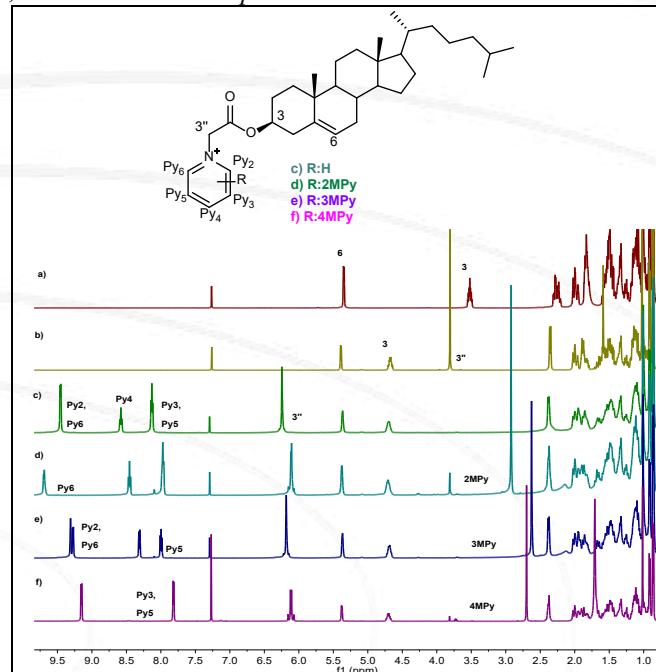


Figura 2. Espectros de RMN de 1H a 500 MHz de a) colesterol, b) bromoacetato de colesterol, c) sal de acetato de piridina de colesterol, d) 2-metilpiridina, e) 3-metilpiridina, f) 4-metilpiridina.

Conclusión

Se sintetizaron y caracterizaron exitosamente sales de piridinio derivadas del acetato de colesterol mediante $RMN - ^1H$, lo que confirma la modificación estructural esperada y es complementado con las propiedades fisicoquímicas obtenidas en la formación de los bioconjugados.

Referencias

1. H. M. T. Albuquerque, C. M. M. Santos, A. M. S. Silva, *Molecules*. 2018, **24**, 116.
2. J. W. Morzycki, *Steroids*. 2014, **83**, 62–79.
3. S. Sowmiah, J. M. S. S. Esperança, L. P. N. Rebelo, C. A. M. Afonso, *Org. Chem. Front.* 2018, **5**, 453–493.
4. M. M. Hammouda, K. M. Elattar, M. M. Rashed, A. M. A. Osman, *RSC Med. Chem.* 2023, **14**, 1934–1972.

TAUTOMERÍA NITROSO-OXIMA EN NITROSO PIRROLES

Mónica Farfán Paredes, Ma. Eugenia Ochoa, Marco Leyva, Rosa Santillan*

Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del Instituto Politécnico Nacional. Departamento de Química. Av. Instituto Politécnico Nacional No. 2508, 07360 Ciudad de México, México. Tel. 5557473800 Ext: 4420 correo: monica.farfán@cinvestav.mx

Palabras clave: nitroso-pirrol, tautomería, oxima.

Introducción. La tautomería juega un papel muy importante en la reactividad química y el reconocimiento molecular, lo que influye en la estabilidad y las propiedades de muchas moléculas funcionales (1). Dentro de los equilibrios tautoméricos que existen, el equilibrio nitroso-oxima es de los menos estudiados y se cree que el tautómero nitroso es más estable por comparación con su análogo de la cetona en el equilibrio ceto-enol (2). En este trabajo se estudió una serie de α -nitroso pirroles con diferentes sustituyentes que permitió establecer el equilibrio nitroso-oxima (3).

Objetivo. Estudiar el equilibrio nitroso-oxima de una serie de α -nitroso pirroles utilizando RMN a temperatura variable.

Metodología. La síntesis de los pirroles 2,4-diaril sustituidos se llevó a cabo partiendo de las nitrobutanonas correspondientes. Para la nitrosación se utilizó NaNO_2 en presencia de HCl para generar el ion nitrosonio *in-situ*. La caracterización de los α -nitroso pirroles se llevó a cabo con RMN en una y dos dimensiones, además de rayos X. El equilibrio nitroso-oxima se estudió con RMN a T variable.

Resultados y discusión. Se sintetizó una serie de 9 derivados de α -nitroso pirrol con grupos arilo y tiofeno. Los pirroles precursores mostraron una señal ancha en el rango 11.40 – 11.60 ppm en DMSO-d_6 correspondiente al NH, mientras que en CDCl_3 el NH aparece en el rango de 8.29 – 8.63 ppm. Una vez introducido el grupo nitroso en posición α del pirrol, no se observó la señal del NH en ningún disolvente, lo que indica que el equilibrio nitroso-oxima es más rápido que la escala de tiempo de la RMN. La señal del hidrógeno β del pirrol en CDCl_3 (un disolvente no polar y de débil interacción) aparece muy fina, mientras que en DMSO-d_6 (un disolvente polar y fuertemente aceptor de hidrógeno) la señal se vuelve muy ancha. Para estudiar el proceso de intercambio del protón del NH pirrólico se llevaron a cabo los experimentos de RMN a temperatura variable. En DMSO se adquirieron los espectros calentando de 20 a 120° sin cambios significativos. Para llevar a cabo los experimentos a baja temperatura se utilizó CD_2Cl_2 . A temperatura ambiente, el equilibrio nitroso-oxima ocurre rápidamente permitiendo observar señales finas y bien definidas. Mientras bajamos la temperatura, las señales se vuelven anchas debido a la presencia de los dos tautómeros. En la figura 1 se muestran los espectros de 20 °C a -80 °C del compuesto **4d**.

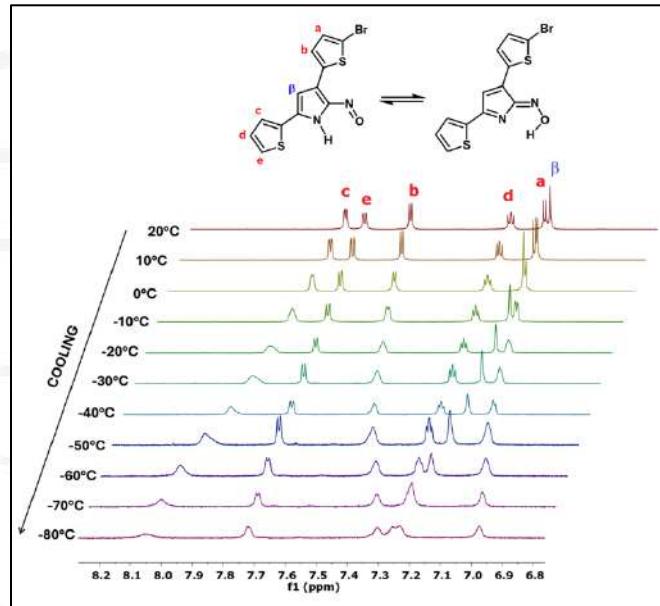


Figura 1. Espectros de ^1H RMN [500 MHz, CD_2Cl_2] del compuesto **4d** de 20 °C a -80 °C.

Conclusiones. Los experimentos de RMN a baja temperatura mostraron el ensanchamiento de las señales debido a la existencia de los dos tautómeros. La señal del NH de los nitroso-pirroles no se observó debido a que el equilibrio nitroso-oxima es más rápido que la escala de tiempo de la RMN. El equilibrio entre las dos formas tautoméricas también se corroboró en estado sólido. Los pirroles que contenían al grupo tiofeno en posición α se lograron aislar en su forma oxima y el trabajo fue recientemente publicado.

Agradecimientos. Los autores agradecen a Teresa Cortés y a Víctor González por adquirir los espectros de RMN. M.F.P. agradece a la SECIHTI por la beca posdoctoral.

Referencias.

- Y. Ding, X. Li, J. P. Hill, K. Ariga, H. Ågren, J. Andréasson, W. Zhu, H. Tian, Y. Xie. *Chem. Eur. J.* 2014, **20** (40), 12910–12916.
- A. I. Kol'tsov, G. M. Kheifets. *Russ. Chem. Rev.* 1971, **40** (9), 773–788.
- M. Farfán-Paredes, M. E. Ochoa, M. Leyva, R. Santillan. *J. Mol. Struct.* 2025, **1344**, 142956.

EFFECTO REGENERATIVO DE ASTAXANTINA NANOEMULSIFICADA: PERFIL METABOLÓMICO POR RMN ¹H EN UN MODELO MURINO DE HEPATOTOXICIDAD

Susana Bautista-Hernández, Socorro Herrera-Meza, Luz Alicia Pascual-Pineda, Alberto Sánchez-Medina*

Instituto de Química Aplicada, Universidad Veracruzana, Av. Dr. Luis Castelazo Ayala s/n, Col. Industrial-Ánimas, C.P. 91190, Xalapa, Veracruz, México. Contacto: albsanchez@uv.mx

Palabras clave: astaxantina, regeneración hepática, metabolómica RMN ¹H

Introducción. La astaxantina es un carotenoide marino que ha demostrado efectos positivos en diversas enfermedades hepáticas. No obstante, su aplicación es limitada por su baja solubilidad y estabilidad, lo que ha impulsado el desarrollo de nanoemulsiones (1). En este contexto, la metabolómica de RMN ¹H ha sido ampliamente empleada para identificar y cuantificar metabolitos en biofluidos (2), revelando alteraciones asociadas a tratamientos o diversas alteraciones de un sistema biológico. Esto la hace una herramienta poderosa para evaluar el impacto metabólico asociado al daño hepático y del tratamiento con astaxantina nanoemulsificada.

Objetivo. Evaluar por RMN ¹H los cambios en el perfil metabolómico sérico tras el tratamiento oral con astaxantina nanoemulsificada en un modelo murino de hepatotoxicidad.

Metodología. Ratas Wistar con hepatotoxicidad inducida por tioacetamida (150 mg/kg, i.p., 2 veces/semana por 6 semanas) recibieron astaxantina (15 mg/kg) en nanoemulsión (NEAX) o en aceite (AX) diariamente durante 4 semanas. Los espectros de RMN ¹H séricos se procesaron con MestReNova v12.0.4, identificando metabolitos con la base HMDB. El análisis multivariante (OPLS-DA) se realizó en SIMCA 18 usando los valores integrales de señales características.

Resultados y discusión. Se identificaron 33 metabolitos séricos, Figura 1: 1, alanina; 2, arginina; 3, glutamina; 4, glicina; 5, leucina; 6, valina; 7, isoleucina; 8, tirosina; 9, histidina; 10, GABA; 11, urea; 12, n-acetilglicoproteína; 13, creatina; 14, acetato; 15, lactato; 16, piruvato; 17, succinato; 18-19, glucosa; 20, lípidos; 21, colesterol esterificado; 22, isobutirato; 23, β-hidroxibutirato; 24, acetoacetato; 25, acetona; 26, colina; 27, fosfocolina; 28, betaina; 29, N-oxido trimetilamina; 30, inosina; 31, metanol; 32, etanol; 33, formato.

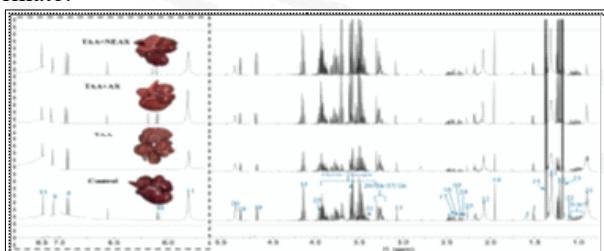


Figura 1. Espectros de RMN ¹H característicos de cada grupo.

El análisis OPLS-DA (Figura 2a) confirmó diferencias claras entre los grupos. El grupo con daño hepático (TAA) se posicionó a la izquierda, mientras que el control y el grupo tratado con NEAX mostraron mayor similitud entre sí. Los gráficos de contribución (Figura 2b) revelan una disminución general de metabolitos por efecto del daño hepático, anomalías que fueron parcialmente restauradas tras el tratamiento con NEAX.

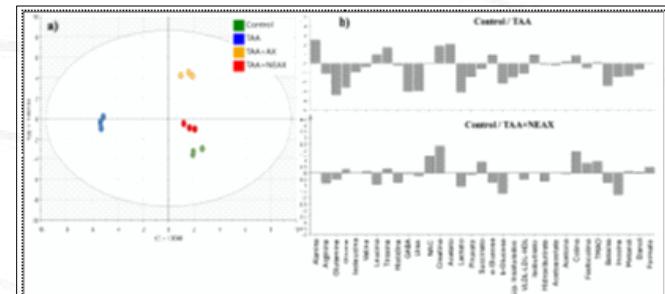


Figura 2. Análisis multivariante OPLS-DA. (a) gráfico de puntuaciones y (b) gráficos de contribución

NEAX mejoró la recuperación del daño hepático, al favorecer la restauración de metabolitos relacionados con el metabolismo energético y de lípidos, limitando la β-oxidación de ácidos grasos y aumentando el nivel de metabolitos relacionados con la inserción de fosfolípidos en la membrana celular durante la regeneración hepática.

Conclusiones. La RMN ¹H reveló rutas metabólicas alteradas por el daño hepático y moduladas por la astaxantina nanoemulsificada.

Agradecimientos. Al apoyo financiero de CONAHCyT (CB-252692). Además de la beca CONAHCyT No. 754604. Y a Q.C. Guadalupe A. Vásquez Reyes por su apoyo en la obtención de los espectros de RMN.

Referencias.

1. S. Bautista-Hernández, M. P. Jiménez-Escobar, M. P. Rascon-Díaz, M. Jiménez-Fernández, C. I. Beristain, A. Sánchez-Medina and L. A. Pascual-Pineda, *Applied Food Research*, 2025, **5**, 101205.
2. G. A. Nagana-Gowda, D. Raftery, *Methods in Molecular Biology*, Humana Press Inc., WA, USA, 2019, vol. 2037, pp. 17-34.

DESARROLLO DE UN MÉTODO DE RMN PARA LA CUANTIFICACIÓN DE OCHRACEÓLIDA A

Nataly Arias-López, Jimmy Ceballos-Cruz, Gumerindo Mirón-López, Gonzalo Mena-Rejón*.

Laboratorio de Química Farmacéutica, Facultad de Química, UADY.

Calle 43 s/n x 96 Paseo de las fuentes y 40 Col. Inalámbrica, Mérida, Yucatán, México.

(999) 9 22 57 11, mrejon@correo.uday.mx

Palabras clave: *qRMN-¹H, ochraceólida A, E. trichotomum.*

Introducción. Ochraceólida A es un triterpeno que ha sido aislado a partir de la corteza de *E. trichotomum*. Este compuesto tiene actividad citotóxica, inhibe la FPTasa y la replicación del VIH tipo I (1). La modificación estructural de esta molécula potencia su actividad antiproliferativa contra cáncer de cérvix y mama, esto la propone como un potencial agente farmacológico (2). Por lo que el desarrollo de un método de cuantificación de esta molécula es un paso crucial en la investigación de este compuesto.

Objetivo. Desarrollar un método por RMN para la cuantificación de ochraceólida A.

Metodología. La corteza de *E. trichotomum* fue sometida a extracción por ultrasonido con CH₂Cl₂ utilizando un diseño Box-Behcken con tres factores. Para la cuantificación de ochraceólida A en los extractos por RMN-¹H se calibró el pulso de 90° y se calculó el T1 del estándar interno (C₈H₈O₂) y del analito disueltos en CDCl₃, mientras que los demás parámetros se establecieron con base a la relación señal-ruido (RSR). La medición fue validada bajo los lineamientos del ICH. Y posteriormente el método fue aplicado a muestras recolectadas entre abril 2023 y febrero 2024.

Resultados y discusión. Los mejores parámetros de extracción fueron un tiempo de 40 min, 60% de amplitud de sonda y una proporción 1:15 de material vegetal (g) – disolvente (mL). Se obtuvo una longitud de pulso de 90° de 10 µs y los tiempos de relajación longitudinal fueron de 948.8 ms y 2.48 s para el analito y estándar interno, respectivamente. Lo que permitió establecer un D1 de 17.36 s, además de una ventana espectral de 10 ppm. Los demás parámetros permitieron una RSR de 354.75 (Cuadro 1), superior a 150 establecido por la ENFSI (3).

Cuadro 1. Optimización de los parámetros por RMN-¹H.

Parámetro	Modificación de TD	Modificación de LB	Modificación de NS	
TD	128 K	64 K	64 K	64 K
NS	16	16	16	64
AQ	13.63 s	6.81 s	6.81 s	6.81 s
SI	64 K	64 K	64 K	64 K
LB	0.3 Hz	0.03 Hz	1 Hz	0.2 Hz
Rotación	No	Sí	Sí	Sí
RSR	126.74	330.7	375.09	333.86
				354.75
Tiempo	9 min	7 min 15 s	7 min 15 s	7 min 15 s
				13 min 39 s
				26 min 37 s

Los espectros de RMN-¹H resultantes mostraron señales de ácido *p*-toluico (8.0 ppm) y ochraceólida A (6.33 ppm) bien

11^a Reunión de Resonancia Magnética Nuclear Experimental, Instituto de Ciencias Básicas, Universidad Veracruzana, Xalapa, 28 y 29 de agosto de 2025

definidas y libres de solapamiento. El Cuadro 2 resume los resultados obtenidos para la validación del método de cuantificación (Cuadro 2), estos resultados fueron comparables con otros trabajos por RMN-¹H.

Cuadro 2. Resultados de la validación de la medición.

Parámetro	Resultado
Selectividad	No existe interferencia ni solapamiento con otra señal.
Linealidad	R ² : 0.9993
Precisión	CV intraensayo: 0.27%
Exactitud	CV precisión intermedia: 0.68% Rango de aceptación: 84.73-115.27% Recuperación: 97.17%
Límite de detección	0.03 mg de ochraceólida A
Límite de exactitud	0.10 mg de ochraceólida A

Aplicando el método de cuantificación se logró determinar que la muestra del bimestre noviembre-diciembre de 2023 contenía la mayor cantidad de ochraceólida A (21.1 mg) en 5 g de corteza de *E. trichotomum*.

Conclusiones. La RMN es útil para la cuantificación de ochraceólida A en extractos diclorometánicos de corteza de *E. trichotomum*. La confiabilidad de los resultados es respaldada por los parámetros de validación del método desarrollado. Dicho método pudo ser aplicado satisfactoriamente en muestras con diferentes fechas de recolección.

Agradecimientos. Los autores agradecen a la Facultad de Química (UADY) por el apoyo para la realización del proyecto, y al SECIHTI por la beca otorgada (No. de beca 4012315).

Referencias.

1. A. D. Herrera, G. J. Mena, S. Hernández, L. Quijano, G. Mirón, *Acta. Cryst.* 2017, **73**, 1475- 1478.
2. A. D. Herrera, J. Us, S. Hernández, G. Mirón, L. Quijano, J.R. Villanueva, G. J. Mena, *J. Mol. Struct.* 2020, **1204**, 1-21.
3. T. Schoenberger, *Guideline for QNMR analysis*, ENFSI, Wiesbaden, Germany, 2019, pp 1-24.

AISLAMIENTO Y CARACTERIZACIÓN DE PSILOCIBINA EN *PSilocybe cubensis* DEL ESTADO DE HIDALGO: AVANCES EN LA INVESTIGACIÓN.

Aylín Rocío Tabal Robles^{1*}, Leticia Romero Bautista², Susana Rojas Lima¹, María Eva González Trujano³, Laura Guzmán Dávalos⁴, J. Martín Torres Valencia¹. ¹Área Académica de Química; ²Área Académica de Biología. Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, Mineral de la Reforma, 42184, Hidalgo. ³Laboratorio de Neurofarmacología de Productos Naturales, Instituto Nacional de Psiquiatría Ramón de la Fuente Muñiz, Tlalpan, CDMX. ⁴Departamento de Botánica y Zoología, Universidad de Guadalajara, Zapopan, Jalisco. *ta260266@uah.edu.mx

Palabras clave: *Psilocybe cubensis*, *psilocibina*, *espectrometría*.

Introducción. La psilocibina es un alcaloide de estructura indólica que se encuentra en especies fúngicas del género *Psilocybe*, el cual exhibe propiedades psicotrópicas debido a su biotransformación en psilocina *in vivo*, un agonista selectivo del receptor serotoninérgico 5-HT_{2A} (1). Este compuesto fue inicialmente aislado a partir de *Psilocybe mexicana* en 1958 (2), y desde entonces ha generado interés científico por su impacto en funciones cognitivas, perceptuales y su potencial aplicación terapéutica en el tratamiento de trastornos neuropsiquiátricos (3). A pesar de la amplia distribución de estas especies fúngicas en México y su diversidad, los estudios químicos sobre su composición química han sido poco explorados.

Objetivo. Aislar y purificar a la psilocibina presente en especímenes silvestres de *Psilocybe cubensis* recolectados en el estado de Hidalgo y caracterizarla estructuralmente mediante RMN de una y dos dimensiones, incluyendo ¹H, ¹³C, COSY, HSQC y HMBC con la finalidad de confirmar su identidad química.

Metodología. Una estrategia secuencial de extracción con metanol asistida por ultrasonido, seguida de concentración y partición bifásica con hexano/agua se empleó para separar compuestos de diferente polaridad. La fracción acuosa se purificó mediante cromatografía en columna (CC) usando celulosa microcristalina y *n*-butanol saturado con agua como eluyente. Las fracciones con indicios de alcaloides fueron sometidas nuevamente a CC con gel de sílice C₁₈ y metanol como fase móvil. Las fracciones obtenidas se conservaron para su posterior análisis.

Resultados y discusión. Psilocibina se aisló de la fracción 5 en forma de resina ámbar oscura (6.6 mg) y se caracterizó mediante RMN de una y dos dimensiones. En el espectro de ¹H (Figura 1A) se observan los protones de la cadena alifática entre 3.3–3.5 ppm, los protones aromáticos entre 7.0–7.5 ppm y los protones de los grupos metilo como una señal simple en 2.9 ppm. En el espectro de ¹³C (Figura 1B) se observaron las señales de los carbonos aromáticos entre 107.44–146.18 ppm, los carbonos de metilenos en 21.77 ppm y 59.04 ppm, además de una señal en 42.74 ppm perteneciente a los carbonos de los metilos unidos al nitrógeno.

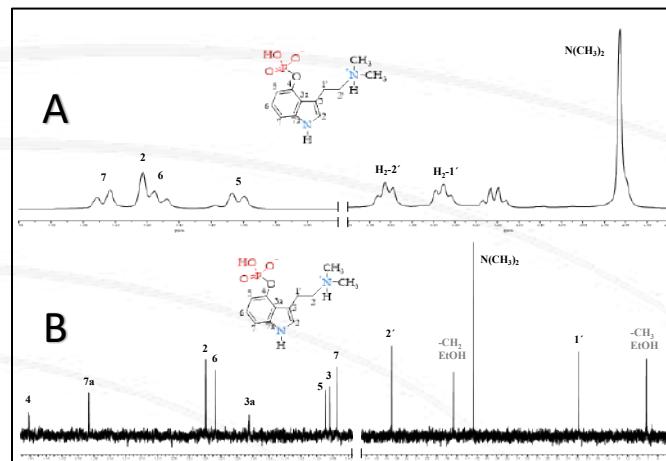


Figura 1. Espectros de RMN de ¹H a 400 MHz (A) y de ¹³C a 100 MHz (B) en D₂O de la psilocibina aislada de *P. cubensis*.

La comparación de los datos espectroscópicos con la literatura (4) reveló una consistencia general. El análisis mediante RMN en 2D, incluyendo el experimento COSY de este compuesto confirmó la identidad del compuesto.

Conclusiones. Por primera vez se aisló psilocibina de *P. cubensis* colectada en el estado de Hidalgo en México, la cual se caracterizó por RMN de ¹H y ¹³C en 1D y 2D. Esta exploración facilita las aplicaciones científicas y terapéuticas de las especies de *Psilocybe*.

Agradecimientos. A SECIHTI por la beca (CVU: 1145607).

Referencias.

1. R. Heim, G. Wasson, *Les champignons hallucinogènes du Mexique; études ethnologiques, taxinomiques, biologiques, physiologiques et chimiques.*, Muséum national d'histoire naturelle, París, 1958,
2. A. Hofmann, R. Heim, H. Kobel, *Experientia*, 1958, **14**, 107–109.
3. A. Hernandez-Leon, R. I. Escamilla-Orozco, A. R. Tabal-Robles, D. Martínez-Vargas, L. Romero-Bautista, G. Escamilla-Soto, O. S. González-Romero, M. Torres-Valencia, M. E. González-Trujano, *J. Ethnopharmacol.*, 2024, 117415
4. O. Shirota, W. Hakamata, Y. Goda, *J. Nat. Prod.*, 2003, **66**, 885–887.

BIOCONJUGADOS DERIVADOS DE HECOGENINA CON SALES DE PIRIDINIO MONO, DI Y TRI METIL-SUSTITUIDAS: SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN.

Edwin Lara Cruz¹, Joel L. Terán², Maricruz Anaya Ruiz³, Alan Carrasco Carballo¹,

¹Laboratorio de Elucidación y Síntesis en Química Orgánica, CQ, ICUAP, BUAP, Puebla, México

²Centro de Química, Instituto de Ciencias, BUAP, 74360 Atlixco, Pue.

³Centro de Investigación Biomédica de Oriente (CIBIOR, IMSS), 74360 Atlixco,
edwin.lara@alumno.buap.mx

Palabras clave: hecogenina, sales de piridinio, RMN.

Introducción. La hecogenina es un compuesto esteroide de origen natural, el cual ha sido de importancia en la investigación por tener diversas actividades biológicas reportadas, sin embargo, al tener baja hidrosolubilidad, puede ser una limitante de su biodisponibilidad (1). Una forma de incrementar esta solubilidad es poder incorporar grupos polares a su estructura, las sales de piridinio son un grupo de compuestos que tienen una buena estabilidad por su carga positiva en el grupo amino, así como su gran solubilidad con solventes polares (2). Un mecanismo por el cual podemos unir estos dos componentes y crear un bioconjugado, sin embargo, para poder confirmar la formación del bioconjugado, es necesario usar distintas técnicas espectroscópicas, entre ellas la Resonancia Magnética Nuclear (RMN).

Objetivo. Caracterizar mediante RMN los derivados de hecogenina conjugados con distintas sales de piridinio mono, di y tri-metilsustituidas

Metodología.

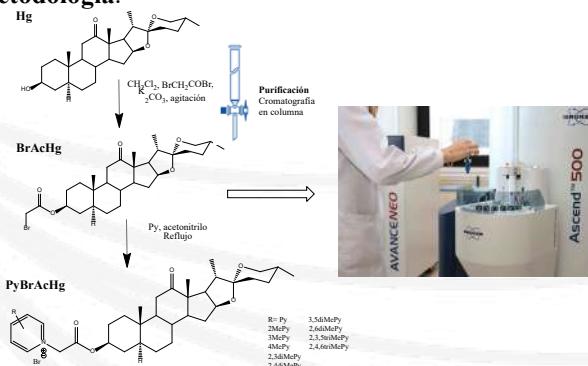


Figura 1. Metodología para la síntesis, purificación y caracterización química.

Resultados y discusión.

La reacción de SN₂ que se utilizó para la síntesis de nuevos bioconjugados por medio del desplazamiento del bromo en el grupo acilado del bromoacetato de hecogenina (figura 1), permite la unión del nuevo compuesto formando una sal, lo cual genera un efecto desprotectivo sobre los hidrógenos del C-3'' y los de la sal de piridinio, particularmente ubicados en el C-2 y C-6 de la piridina, lo cual se puede observar en las expansiones realizadas para los H-3'', mostrando un desplazamiento a mayor frecuencia por el efecto del N⁺, así

que los protones más cerca del N⁺ tendrán un mayor desplazamiento químico, un ejemplo se puede observar en la tabla 1, donde los protones no metilados de 2 o 6 de la piridina, rondan un desplazamiento de 8.9 – 9.5 ppm, según sea el caso, para el caso del protón del C3, se mantiene en un rango de 4.7- 4.81 ppm con las sales de piridinio, aunque al principio en la bromoacetilación de la materia la hecogenina, sufre un mayor desplazamiento, de 3.6 a 4.68.

Tabla 1. Desplazamientos químicos de la hecogenina, el bromoacetato de hecogenina y los bioconjugados de sales de piridinio.

Compuesto	Señales relevantes de ¹ H (ppm)						
	H-3	H-3'	H-3'' de 2Py	H-3'' de 3Py	H-3'' de 4Py	H-3'' de 5Py	H-3'' de 6Py
Hg	3.6	-	-	-	-	-	-
BrAcOHg	4.68	3.72	-	-	-	-	-
Py ⁺ AcOHg Br ⁻	4.7	5.62	9.03	8.73	8.21	8.73	9.03
2MePy ⁺ AcOHg Br ⁻	4.78	6.13	2.83	7.88	7.22	7.88	8.36
3MePy ⁺ AcOHg Br ⁻	4.76	6.12	9.11	2.62	8.01	8.3	9.11
4MePy ⁺ AcOHg Br ⁻	4.73	6.09	9.18	7.83	2.61	7.83	9.18
2,3diMePy ⁺ AcOHg Br ⁻	4.72	6.11	2.7	2.5	7.71	8.15	9.5
2,4diMePy ⁺ AcOHg Br ⁻	4.71	5.93	2.71	7.6	2.51	7.5	9.3
3,5diMePy ⁺ AcOHg Br ⁻	4.7	6.06	8.9	2.51	8	2.5	8.9
2,6diMePy ⁺ AcOHg Br ⁻	4.71	6.14	2.86	7.47	7.71	7.19	2.8
2,3,5triMePy ⁺ AcOHg Br ⁻	4.79	6.08	2.68	2.54	8	2.52	9.42
2,4,6triMePy ⁺ AcOHg Br ⁻	4.72	6.01	3.39	7.49	2.58	7.22	3.28

Conclusiones.

Los resultados de RMN indican que las diferentes sales de piridinio tienen un impacto directo en el desplazamiento químico de los protones del carbono (3''), el cual dependiendo si está unido o no y en qué tipo de piridina, cambia su multiplicidad.

Referencias.

1. M. Borgues, F. Rocha, J. Souza, F. Johansson, Biomed. Pharmacother. 2023, 163, 114251.
2. B. Liagre, P. Vergne, L. Leger, J. Beneytout. Int. J. Mol. Med. 2007, 20 (4), 451–458.

ANÁLISIS ESPECTROSCÓPICO PARA LA CARACTERIZACIÓN DE LA RUTA DE SÍNTESIS DE LA ALLOPREGNANOLONA 17-HIDRAZINIL-2-OXOETILO PIRIDINA-1-ION BROMURO MEDIANTE RMN E IR.

J. Luis Sánchez-Juárez¹, Hisami Rodríguez-Matsui¹, Joel L. Teran², Alan Carrasco Carballo¹

¹Laboratorio de Elucidación y Síntesis en Química Orgánica, ICUAP, BUAP, Puebla México.

jose.sanchezjua@alumno.buap.mx

Palabras clave: bioconjugados esteroidales, RMN, IR, sal de piridinio.

Introducción. Los bioconjugados esteroidales han surgido como moléculas potenciales con propiedades farmacológicas y farmacéuticas mejoradas (1). La allopregnanolona, así como sus derivados, han demostrado un destacado potencial neuroprotector, con beneficiosos en el traumatismo medular, enfermedades neurodegenerativas como Alzheimer y Parkinson, así como en la prevención de la muerte neuronal y la neuro inflamación (2). Por ello, los bioconjugados de allopregnanolona se perfilan como una alternativa terapéutica innovadora con potencial aplicación en múltiples patologías (3). Por otra parte, la presencia tanto en compuestos naturales como en fármacos, y la diversidad en actividades biológicas de las sales de piridinio constituyen una plataforma versátil para el diseño de nuevos agentes terapéuticos. Debido entonces a sus propiedades y aplicaciones resalta su potencial para desarrollar bioconjugados con funcionalidades mejoradas y aplicaciones terapéuticas variadas (4).

Objetivo. Evaluar la pureza de los productos obtenidos por síntesis (figura 1) mediante el análisis comparativo de espectroscopía de RMN e IR.

Metodología.

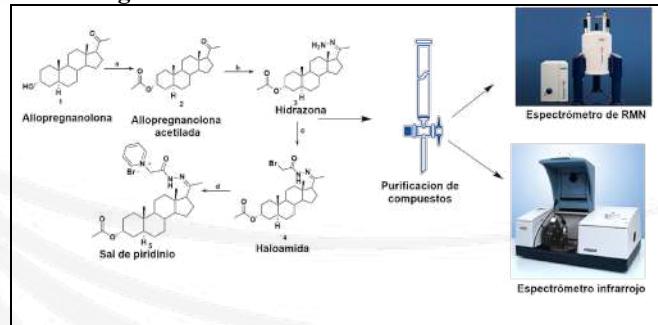


Figura 1. Esquema general de metodología de síntesis, purificación y caracterización de compuestos.

Resultados y discusión. El análisis conjunto de los espectros de IR y RMN (Tablas 1 y 2) permite confirmar las modificaciones estructurales derivadas de la funcionalización de la allopregnanolona. En los derivados acetilado y haloamida, la presencia de una banda intensa a 1721 cm^{-1} en IR indica la formación de enlaces éster y amida, respectivamente. La desaparición de la banda O-H ($\sim 3435\text{ cm}^{-1}$) confirma la transformación del grupo hidroxilo. En la sal de piridinio, la banda a 2365 cm^{-1} sugiere vibraciones características de un sistema cargado.

En RMN, el desplazamiento del protón H-3 de 3.59 a 4.62 ppm y del carbono C-3 de 71.20 a 73.64 ppm en el derivado acetilado refleja un entorno más desprotegido por el grupo carbonilo. La haloamida muestra señales a 4.16 y 153.9 ppm,

así como un protón NH a 11.0 ppm, confirmando la presencia del grupo amida. En la sal de piridinio, los desplazamientos entre 6.18 y 9.48 ppm corresponden a protones aromáticos del anillo piridínico, y el NH a 11.65 ppm sugiere interacción iónica o de puente de hidrógeno.

Tabla 1. Datos de IR.

Número de onda (cm^{-1})	1	2	4	5
3000-2500	3171, 3037, 2927	3171, 3037, 2927	3171, 3037, 2927	3171, 3037, 2927
2500-2000	2365	2365	2365	2365
2000-1500	1721, 1454	1721, 1454	1721, 1454	1721, 1454
1500-1000	1260, 1026	1260, 1026	1260, 1026	1260, 1026
1000-500	954, 891, 769, 665, 665, 611, 567, 567, 472	954, 891, 769, 665, 611, 567, 472	954, 891, 769, 665, 611, 567, 472	954, 891, 769, 665, 611, 567, 567, 472

Tabla 2. Desplazamientos de RMN

Desplazamientos de $^1\text{H}/^1\text{C}$ ppm	1	2	4	5
3	3.59/71.20	4.62/73.64	-	-
21	-	-	1.84/16.74	2.20/20.56
20''	-	-	4.16/15.3.9	6.27 – 6.18
NH	-	-	8.5	11.0
Py2	-	-	-	9.48/127.8
Py3	-	-	-	8.07/145.9
Py4	-	-	-	8.49/145.4

Conclusiones. Una nueva sal de piridinio esteroide derivada de la allopregnanolona fue sintetizada y caracterizada comparando la RMN e IR, siendo la RMN clave para la determinación de la presencia de efectos como isomería geométrica detectada a diferencia de lo observado por IR.

Referencias.

- 1 R. Bansal and A. Suryan, *ACS Bio Med Chem Au*, 2022, **2**, 340–369.
- 2 A. G. G. García, C. M. Contreras and J. L. D. Meza, *Salud Mental*, 2000, **23**, 42–48.
- 3 I. Bartolomé Torrell, <http://purl.org/de/dcmitype/Text>, Universitat Autònoma de Barcelona, 2018.

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE TRIPTOFANOATOS DE ALQUILO

Roberto A. Galeana-Ascencio¹, Ramsés E. Ramírez Gutiérrez², Sandra Raquel Reyez-Carmona³, Alberto Ramírez Mata³, Alan Carrasco-Carballo¹

¹Laboratorio de Elucidación y Síntesis en Química Orgánica, CQ, ICUAP, BUAP, Puebla, México.

²Facultad de Ciencias Químicas, BUAP, Puebla, México.

³Laboratorio de Interacción bacteria-planta, Centro de Investigaciones en Ciencias Microbiológicas, ICUAP, BUAP, Puebla, México.

roberto.galeanaa@alumno.buap.mx

Palabras clave: síntesis, triptofanoatos de alquilo, compuestos bioactivos.

Introducción. El triptófano es un aminoácido con un anillo indólico, precursor de compuestos bioactivos (1). Modificaciones químicas recientes han generado derivados con diversas actividades biológicas, destacando como antivirales, fungicidas, quimioterapéuticos, antibióticos y en el tratamiento de enfermedades neurodegenerativas (2, 3). El proyecto se centra en la síntesis de derivados del triptófano mediante esterificación, y caracterización estructural con Resonancia Magnética Nuclear, a fin de determinar el efecto de los enantiómeros L/D del aminoácido, con respecto a los productos sintetizados.

Objetivo. Sintetizar y caracterizar nuevos derivados análogos del triptófano con ayuda de la RMN.

Metodología. Se estableció la siguiente ruta sintética (figura 1) para la obtención de los triptofanoatos de alquilo, utilizando cloruro de tionilo como agente acilante, para proceder a la caracterización por RMN.

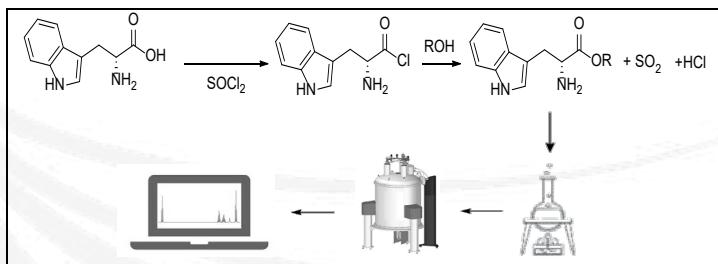


Figura 1. Ruta sintética para la obtención de Triptofanoatos de alquilo.

Resultados y discusión. Las señales que nos confirman la obtención del producto (tabla 1) son las que se observan en el protón Ind1, el cual, es el más desplazado, al tratarse de un protón base N, y por la tensión generada por el anillo de 5 carbonos en el que se localiza, dicho desplazamiento se observa en ambos enantiómeros (L y D). En 8.7 ppm, se aprecia la señal característica del grupo amino, señal que no se observa en los espectros de la materia prima. El resto de los protones del anillo indólico, se localizan en la región de 7-7.5 ppm. En la región de menor desplazamiento, se observan la señal de H-2, que por su cercanía al grupo amino, se

desplaza un poco más, en comparación con los protones de n-butilo.

Tabla 1. Desplazamiento químico con señales de interés de L/D-Triptófano y L/D-Triptofanoato de n-butilo

Molécula	¹ H	¹³ C
D-Trp	Ind1 - 11.10 ppm Ind3 - N/A 1- N/A	Ind1 - N/A Ind3 - 109.9 ppm 1- 171.6 ppm
L-Trp	Ind1 - 11.07 ppm Ind3 - N/A 1- N/A	Ind1 - N/A Ind3 - 110 ppm 1- 171.1 ppm
D- TrpOnBu·HCl	Ind1 - 11.16 ppm Ind3 - N/A 1- N/A 1'- 3.99 ppm	Ind1 - N/A Ind3 - N/A 1- 169.9 ppm 1'- 65.7 ppm
L- TrpOnBu·HCl	Ind1 - 11.16 ppm Ind3 - N/A 1- N/A 1'- 3.99 ppm	Ind1 - N/A Ind3 - 106.9 ppm 1- 169.9 ppm 1'- 65.7 ppm

La identificación de 1', se vuelve fundamental para la confirmación de la formación del éster. Finalmente, la señal de 4', es característica de los metilos, y como se aprecia, es la señal que tiene menor desplazamiento químico. Con respecto a los enantiómeros, se observan las mismas señales y sin modificaciones significativas en los desplazamientos químicos, este fenómeno se repite en el resto de los derivados sintetizados, se observa el mismo efecto para los halogenuros de metilo, etilo, propilo, isopropilo, pentilo, ciclohexilo, fenilo y bencilo.

Conclusiones. Se sintetizaron diversos ésteres derivados del L- y D-triptófano utilizando distintos alcoholes alcoholes diversamente sustituidos. Se determinó la correcta obtención y pureza de estos compuestos mediante espectroscopía de RMN de ¹H y ¹³C, esto para su posterior evaluación biológica como potenciales antimicrobianos.

Referencias.

1. S. Xiao, Z. Wang, B. Wang, B. Hou, J. Cheng, T. Bai, Y. Zhang, W. Wang, L. Yan and J. Zhang, *Front. Microbiol.*, 2023, **14**, 1099098.
2. L. Li, R. Yang, J. Liu, J. Zhang, H. Song, Y. Liu and Q. Wang, *Molecules*, 2022, **27**, 5758.
3. Y. Huang, Y. Liu, Y. Liu, H. Song and Q. Wang, *Bioorganic & Medicinal Chemistry*, 2016, **24**, 462–473.

RUTA SINTETICA PARA LA OBTENCION DE BIOCONJUGADOS DE HIDROXIBENZOATOS DE HECOGENILO

Juan Alex Hernández Rivera^{1*}, Sandra Raquel Reyes Carmona², Alan Carrasco Carballo¹

¹Laboratorio de Elucidación y Síntesis en Química Orgánica, CQ, ICUAP, BUAP, Puebla, México

²Laboratorio de Interacción Bacteria-Planta, CICM, ICUAP, BUAP, Puebla 72570, México.

juan.hernandezrivera@viep.com.mx, 9512100447

Palabras clave: qRMN, esterificación, bencilación.

Introducción.

En química orgánica, los bioconjugados son compuestos con gran potencial en el área de la salud, en parte por el efecto sinérgico que se puede generar, y por la posible mejora de la biodisponibilidad (1). Dos grupos destacados son: 1) los derivados hidroxibenzoicos que han demostrado múltiples aplicaciones biológicas destacadas como su actividad antioxidante, antimicrobiana, antiinflamatoria o cardioprotectora, y 2) los esteroides, los cuales han mostrado relevancia farmacológica, ofreciendo atractivas moléculas de partida (2, 3).

Objetivo.

Elucidar los compuestos generados en una ruta de síntesis para obtener hidroxibenzoatos de hecogenilo por RMN.

Metodología.

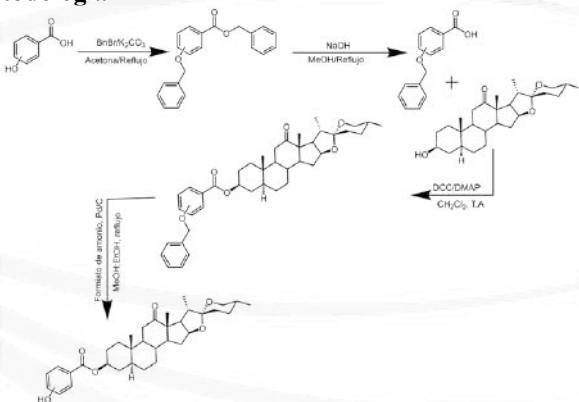


Figura 1. Ruta de síntesis propuesta para la protección, esterificación y desbencilación.

Resultados y discusión.

La reacción de esterificación con los ácidos hidroxibenzoicos genera una competencia entre el carácter nucleofílico del hidroxilo en C-3 de la hecogenina y el fenólico, generando bajos rendimientos, como el caso del 24 % obtenido por la conversión del 3-hidroxibenzoato de hecogenilo. Por lo cual es necesario optar por reacciones mas selectivas, mediante la protección del hidroxilo fenólico previo a su esterificación con el esteroide (figura 1).

La primera etapa de bencilación de los diferentes ácidos mostro porcentajes de conversión superiores al 85% en todos los casos, con ayuda de experimentos como HMBC, se puede

comprobar la posición de los grupos bencilo, por la correlación que se establece con algunos carbonos clave.

Tabla 1. Rendimiento y señales características de dos bioconjugados obtenidos.

Producto	Rendimiento (%)	δ (ppm)
HgAc2OHBz	24	H-3: 4.89 H-Ar3: 6.82 C-3: 74.39
HgAc2OBn	75	H-3: 4.86 H-Ar3: 6.43 H-Bn: 5.05 C-3: 73.87
HgAc2OH	84	H-3: 4.83 H-Ar3: 6.79 C-3: 74.85
HgAc3OH	80	H-3: 4.84 H-Ar4: 6.99 C-3: 74.02
HgAc4OH	70	H-3: 4.85 H-Ar3: 6.91 C-3: 74.80

Conclusiones.

La ruta de síntesis propuesta para la bencilación de los ácidos hidroxibenzoicos mostro buenos rendimientos, se pudo corroborar la obtención y rendimiento de cada uno de los intermediarios mediante RMN, siendo esta una herramienta fundamental para la correcta elucidación de los productos.

Referencias.

1. R. Bansal and A. Suryan, *ACS Bio Med Chem Au.* 2022, **2**, 340–369.
2. H. Ö. Kabakas, M. S. Kürkçü, K. A. O. Taşdelen and B. Çöl, *Eskişehir Technical University Journal of Science and Technology A - Applied Sciences and Engineering*, 2024, **25**, 66–77.
3. L.-W. Tian, Z. Zhang, H.-L. Long and Y.-J. Zhang, *Nat. Prod. Bioprospect.* 2017, **7**, 283–298.
4. R. Ahmed, *Radinka Journal of Health Science*, 2025, **2**, 391–396.

SÍNTESIS DE HIDROPERÓXIDOS DE PIRROLOISOINDOLONAS: LA RMN DE 1D Y 2D EN LA DIASTEREOSELECTIVIDAD DE LOS MECANISMOS DE REACCIÓN RADICALARIA

José Arturo Altamirano Espino¹, Natalia Reyes Vallejo¹, Fernando Rivera Sánchez¹, Catalina Soriano Correa^{2*}, Adelfo Natalio Reyes Vallejo^{1*}. ¹Unidad Multidisciplinaria de Investigación Experimental, Laboratorio de Síntesis Farmacéutica. ²Unidad de Química Computacional, Área de Química Computacional y Modelado Molecular. FES-Zaragoza, Universidad Nacional Autónoma de México, Batalla 5 de mayo s/n esquina Fuerte de Loreto, Ejército de Oriente, Iztapalapa, 09230 Ciudad de México, México. 5527995058, aaltamirano7@gmail.com

Palabras clave: *Pirroloisoindolonas, NOESY, DFT.*

Introducción. Las pirroloisoindolonas son heterociclos que presentan el núcleo estructural de los alcaloides de la familia de las pirrolizidinas, de gran valor biológico, presente en los productos de síntesis por reacciones dominó Michael-aldólicas a partir de metil ésteres de *N*-ftaloil-aminoácidos y que han dado lugar a estudios en química medicinal hacia diversos blancos terapéuticos (1-4). En este trabajo se desarrolló el estudio por espectroscopía de RMN en 1D y 2D en la asignación detallada de nuevos hidroperóxidos de pirroloisoindolonas, observando los fenómenos confirmados en el análisis de una estructura en 3D de rayos-X y estudios de DFT que han permitido la publicación de resultados novedosos (5) que se complementan dentro de este trabajo.

Objetivo. Determinar los mecanismos de las reacciones diastereoselectivas de hidroperoxidación radicalaria de pirroloisoindolonas derivadas de aminoácidos, basados en las señales de ¹H de hidroperóxido y ¹³C correspondientes a las estructuras sugeridas por DFT.

Metodología. A partir de los productos de síntesis abordados para ensayos biológicos de *in silico*, *in vitro* e *in vivo* de nuevas pirroloisoindolonas, se obtuvo la espectroscopía de RMN de ¹H, ¹³C, COSY, HSCQ, DEPT90 y 135, así como de NOESY, de hidroperóxidos obtenidos, con el apoyo de los rayos-X y estudios de DFT-M06-2X.

Resultados y discusión. Se encontraron patrones de desplazamiento homogéneos asociados a su reactividad y grupos funcionales presentes. La elucidación estructural de hidroperóxidos no esperados como productos de reacciones fotoquímicas llevó al análisis detallado de espectros de 2D como el de NOESY que correlacionaron la configuración relativa y conformación sugeridas por los rayos-X y los estudios de DFT (Figura 1); se obtuvieron las geometrías 3D que relacionan el puente de hidrógeno intramolecular con el mecanismo de reacción radicalaria diastereoselectiva más el desplazamiento constante por ambiente químico y efectos de desprotección de núcleos de ¹³C-RMN adyacentes a los hidroperóxidos a 103.7 ppm.

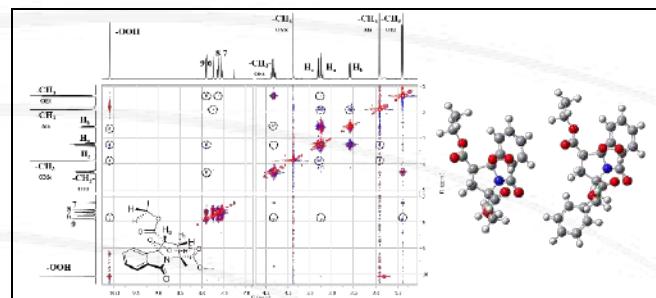


Figura 1. Espectro de RMN (400 MHz, CDCl_3 -NOESY) del hidroperóxido obtenido y base para las geometrías reoptimizadas de pirroloisoindolonas de alanina y fenilalanina con puentes de hidrógeno observados en ¹H-RMN a 10.09 y 6.23 ppm (1.8-1.9 Å).

Conclusiones. Gracias a la espectroscopía de RMN fue posible corroborar los hidroperóxidos de pirroloisoindolona como productos de un proceso *solvent-free* mediante un mecanismo radicalario estabilizada por el puente de hidrógeno intramolecular observado, cuya estabilidad y geometría, llevaron a tiempos de relajación prolongados en ¹H-RMN, mientras que el carbono bencílico unido al grupo hidroperóxido fue una constante clave de desplazamiento en la elucidación de estos nuevos compuestos de interés biológico creciente.

Agradecimientos. A la Dirección General de Asuntos del Personal Académico (DGAPA, UNAM) por la beca postdoctoral recibida y por el apoyo financiero a través de los proyectos PAPIIT IN220624 e IN210023. A la Dirección General de Cómputo y de Tecnologías de Información y Comunicación (DGTIC) de la UNAM por la asignación de tiempo de computadora en la supercomputadora Miztli (LANCAD-UNAMDGTIC-203).

Referencias.

1. A. Reyes, *et al.*, *Tetrahedron*, 1999, **55**, 11187–11202.
2. O. Sánchez-Antonio, *et al.*, *Tetrahedron*, 2019, **75**, 130594.
3. E. Andrade-Jorge, *et al.*, *Med. Chem. Res.*, 2022, **31**, 851–866.
4. E. Andrade-Jorge, *et al.*, *Med. Chem. Res.*, 2023, **32**, 2405–2418.
5. N. Reyes-Vallejo, *et al.*, *J. Mol. Struct.*, 2025, **1345**, 143100.

Presentaciones de cartel

PRESENTACIONES CARTEL

No. Cartel	Nombre del trabajo y autores	No. página
	USO DE LA RMN PARA EL ANÁLISIS CONFORMACIONAL DE UN TRITERPENO	
C01	Mónica Díaz-Fernández, Karla Cahún-Uicab, Viviana Roche-Llerena, Leonardo Hernández, Geonel Rodríguez-Gattorno, Teresa Cortez-Picasso, Armando Ariza-Castolo, María A. Fernández-Herrera	049
	CONDUCTA SINGULAR DE COPOLIMEROS AB DIBLOCK EN DOSY	
C02	Gerardo Cedillo Valverde, René Salgado Delgado, Areli Marlen Salgado Delgado, Alfredo Olarte Paredes, Salvador López Morales, Manuel García Hipólito	050
	SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN POR RMN DEL BENZOATO DE LA OXIMA DERIVADA DE LA COLESTANONA.	
C03	Joseph F. Almazan-Escamilla, Guiee Niza Lopez-Castillo, David M. Aparicio-Solano, Yazmin Gómez-Gómez, Jorge Organista-Nava, Berenice Illades-Aguiar, Marco A. Leyva-Vázquez, Alan Carrasco-Carballo	051
	SÍNTESIS DE UN [5,5] ESPIROCICLO DERIVADO DE LA D-GLUCOSA VÍA CATALISIS FOTOREDOX	
C04	Ninotchka Tapia Arenas, Leonardo Xochicale Santana, Fernando Sartillo Piscil, Omar Cortezano Arellano	052
	SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE NUEVAS SALES DE 3-(METIL/HIDROXI/3ACETIL)-PIRIDINIO DERIVADAS DE ACETATO DE ALLOPREGNANOLONA	
C05	Olga Hisami Rodríguez Matsui, Elena Hernández-Caballero, Joel L. Terán, Alan Carrasco-Carballo	053
	EL USO DE LA RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DE PROTÓN EN LA BÚSQUEDA DE LÍPIDOS BIOACTIVOS (OMEGA-3): ESTUDIO DE CASO <i>Dendropogonella rufescens</i> (Bryophyta: Cryphaeaceae)	
C06	Néstor Emanuel Hernández Vidal, Holber Zuleta Prada, Diana Guerra Ramírez, Diana Becerra Morales, Salvador Valle Guadarrama	054
	SÍNTESIS MODULAR DE SALES DICATIÓNICAS DE 1,2,3-TRIAZOLIO Y SU UTILIZACIÓN PARA LA FORMACIÓN DE COMPLEJOS HETEROBIMETÁLICOS	
C07	Francisco Javier Ruiz Mendoza, Emmanuel Campos Domínguez, Daniel Mendoza Espinosa	055

PRESENTACIONES CARTEL

No. Cartel	Nombre del trabajo y autores	No. página
C08	Efecto dinámico en Resonancia Magnética Nuclear: análisis conformacional del anhídrido oxidiftálico Cielo Domínguez-Leal, Hilda Barquín-Ledesma, Paul Mitchell Paredes-Hernández, Ma. Remedios Mendoza-López, Oscar García-Barradas	056
C09	SÍNTESIS Y ELUCIDACIÓN DE DIPÉPTIDOS CATIÓNICOS Zuryasdai Corrales Ocampo, Lemuel Pérez Picaso, Miguel Ángel Peña Rico, Omar Viñas Bravo, Roxana Martínez Pascual y Adolfo López Torres.	057
C10	Síntesis y caracterización por RMN de compuestos derivados de Morfolina con posible actividad biológica Andrea Sosa-Barrios, Rosmarbel-Morales Nava, Jorge Juárez-Posadas	058
C11	ELUCIDACIÓN ESTRUCTURAL POR RMN DE UN NUEVO CICLOPÉPTIDO OBTENIDO DE LAS SEMILLAS DE ANNONA DIVERSIFOLIA SAFF Ulises Murrieta-Dionicio, Benito Reyes-Trejo, Holber Zuleta-Prada, José Federico del Río Portilla	059
C12	Evaluación de la generación de oxígeno singulete de colorantes cosméticos mediante la foto-oxidación de ergosterol Karmen Manzano, Fernanda Vázquez-Ortega, Limni Ramírez, Roberto Hernández, Irene Lagunes, Ángel Trigos	060
C13	2-ACILACIÓN DEL 1H-PIRROL MEDIANTE UNA REACCIÓN DE FRIEDEL-CRAFTS Y SU CARACTERIZACIÓN MEDIANTE RMN DE ^1H Y ^{13}C. Ángel Yahir Quiroz López, José Alvano Pérez Bautista, Omar Cortezano Arellano	061
C14	DETERMINACIÓN DE LA DINÁMICA DE HIDRÓLISIS Y MUTORROTACIÓN DE DISACÁRIDOS POR RMN Marco Josué Ramos Paredes, Apolo Velasco Ramírez, José Manuel López Alcaraz, Isabel Iraí Aguilar de la Portilla, Víctor Manuel González Díaz, Armando Ariza Castolo	062
C15	ANÁLISIS ESTRUCTURAL DEL PRODUCTO DE LA REACCIÓN INDOL-MANNICH MEDIANTE RMN BIDIMENSIONAL Juan Carlos Ruíz Javier, Jaqueline Jiménez Hernández, Jorge R. Juárez Posadas, Víctor Gómez Calvario	063

PRESENTACIONES CARTEL

No. Cartel	Nombre del trabajo y autores	No. página
C16	ESTUDIO DE COMPLEJOS DE TRIFENILESTAÑO (IV) DERIVADOS DE CARBOXILATOS DE ISATINA E INDIRUBINA Jose Luis Maya-García, Marcela López-Cardoso, Gabriela Vargas-Pineda, Perla Román-Bravo, Raymundo Cea-Olivares.	064
C17	CARACTERIZACIÓN DE COMPUESTOS HETERODITÓPICOS CON CIPROFLOXACINO Y TETRAZOL CON DI-ORGANOESTAÑO(IV) Brenda Jocelin Alonso Uribe, Marco Antonio Pérez-Salgado, Marcela López-Cardoso, Gabriela Vargas-Pineda, Perla Román-Bravo, Raymundo Cea-Olivares	065
C18	Síntesis, caracterización y estudio de reconocimiento de dos imidas derivadas del anhídrido 1,8-naftálico Hilda Barquín-Ledesma, Cielo Domínguez-Leal, Karina-Mondragón-Vásquez, Jorge Guillermo Domínguez-Chávez, Ma. Remedios Mendoza-López, Oscar García-Barradas	066
C19	OBTENCIÓN DE NUEVOS DERIVADOS AMÍDICOS DEL 2-(1H-BENCIMIDAZOL-2-IL)ANILINA Campos Ojeda Alberto, Sánchez Meza Alfonso Fabián, Jesús Alberto Barrón Zambrano, Gumersindo Mirón López, Jimmy Josué Ceballos Cruz, Rubén Marrero Carballo, Adriana	067
C20	Semillas de <i>Ricinus communis</i>: Potencial Biocatalítico para la Esterificación y Transesterificación de Ácidos Grasos para Producir Biodiesel Rodolfo Méndez Bellido, Héctor Luna Contla, Ernesto Sánchez Mendoza, Tomás Guerrero Briseño, Arturo Coaviche Yoval, Ricardo Tovar Miranda	068
C21	SÍNTESIS ENANTIOSELECTIVA DE (R)-4-(2-HIDROXI-1-FENILETIL)MORFOLIN-3-ONA Eduardo Domínguez Montalvo, Jacqueline Jiménez Hernández, Víctor Gómez Calvario, Jorge R. Juárez Posadas	069
C22	SÍNTESIS DE PIPERIDONA Y EVALUACIÓN DE SU POTENCIAL ACTIVIDAD BIOLÓGICA María Fernanda Martínez Hernández, Jacqueline Jiménez Hernández, Víctor Gómez Calvario, Jorge R. Juárez Posadas, Axel Esteban Carrillo Cervantes	070

PRESENTACIONES CARTEL

No. Cartel	Nombre del trabajo y autores	No. página
C23	SUPLEMENTOS NUTRICIONALES PARA DEPORTISTAS: ANÁLISIS POR RMN DE GELES ENERGÉTICOS Alma L. Saucedo, Benito Reyes-Trejo, Susana Angélica Cuéllar-Moreno	071
C24	ANÁLISIS POR RMN DE ^1H DE LAS INTERACCIONES MOLÉCULARES NO COVALENTES ENTRE QUERCETINA Y CLORURO DE COLINA Jehovani Miguel Lázaro Rangel, Zaira Domínguez, Claudia Isabel Virues Colorado, Magali Salas Reyes	072
C25	SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE 7-FENIL-6-HIDROXI-1,4-OXAZEPAN-5-ONA Y 2-[FENIL(HIDROXI)METIL]MORFOLIN-3-ONA A PARTIR DE UNAS TRANS-EPOXIAMIDAS DERIVADAS DE LA (S)-FENILETILAMINA David Miguel Aparicio Solano, Olga Hisami Rodríguez Matsui, Alan Carrasco-Carballo, Joel L. Terán	073
C26	SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN MEDIANTE RMN DE BIOCONJUGADOS DE DIOSGENINA: BzDg, nOHBzDg Y nOBnBzDg Luz María Fuentes Cortes, Juan Alex Hernández Rivera, M. Elena Hernández-Caballero, Ivonne Pérez-Xochipa, Alan Carrasco Carballo	074
C27	CARACTERIZACIÓN ESTRUCTURAL POR RMN DE PRODUCTOS DE SN2 EN DERIVADOS DE ALLOPREGNANOLONA Uriel Aca Márquez, Ivone Pérez-Xochipa, Marta Elena Hernández-Caballero, David M. Aparicio Solano, Alan Carrasco Carballo	075
C28	BIOCONJUGADOS AMINOESTEROIDALES DE 17α-HIDROXIPREGNENOLONA: EVALUACIÓN DE SÍNTESIS MEDIANTE RMN ^1H Y ^{13}C Hannia Ramírez-Machado, Guiee N. López-Castillo, Marta Elena Hernández-Caballero, Joel L. Terán, Alan Carrasco-Carballo	076
C29	USO DEL NaBH4 COMO AGENTE REDUCTOR EN LA SÍNTESIS DEL 2-BUTIL-1H-PIRROL CARACTERIZADO MEDIANTE RMN DE ^1H Y ^{13}C José Manuel Cíntora Rivera, José Alvano Pérez Bautista, Omar Cortezano Arellano	077

PRESENTACIONES CARTEL

No. Cartel	Nombre del trabajo y autores	No. página
C30	Resolución y Asignación de la Configuración Absoluta de cis-2,3-dihidrobenzofuranos Utilizando Agentes de Derivatización Quiral (ADQ) Diego Andrade Marcial, Omar Cortezano Arellano, Myrna Hernández Matus, Arturo Coaviche Yoval,4 Ricardo Tovar Miranda	078
C31	SÍNTESIS Y ELUCIDACIÓN DE HIDRAZONAS DERIVADAS DE ALDEHIDOS AROMÁTICOS Jorge R. Belchez Rodríguez, Joel L Terán, Alan Carrasco Carballo	079
C32	SÍNTESIS, ESTUDIO ESTRUCTURAL MEDIANTE RMN Y PROPIEDADES ANTIPIROLIFERATIVAS DE DOS ENANTIÓMEROS DERIVADOS DEL B-NAFTOL Maritza Mendoza de la Cruz, Shiomara Gadsden Andrade, Gabriela A. Sosa Ortiz, Tomás Guerrero	080
C33	Análisis por RMN de ^{13}C en estado sólido del ensamblaje de celulosa bacteriana a partir de D Glucosa ^{13}C1 marcada y su efecto de la adición de etanol y glicerol Brenda Gisella Curiel-Oлагue, Yolanda González-García, Juan Carlos Meza-Contreras, Ricardo Manríquez-González	081
C34	Potencial Antioxidante del 3-metoxicatecol obtenido del hongo marino <i>Daldinia eschscholtzii</i> Rubén Antonio García-Zavaleta, Karla G. Olivo-Flores, Ángel Trigos, Manuel E. Medina, Alan Couttolenc, César Espinoza	082
C35	ANÁLISIS DE LAS INTERACCIONES MOLECULARES ENTRE D-GLUCOSAMINA Y N-ACETIL-GLUCOSAMINA CON CURCUMINA Y ÉSTER FENETÍLICO DEL ÁCIDO CAFEICO EN DMSO MEDIANTE ESPECTROSCOPÍA DE RMN DE ^1H Evelin Martínez Benavidez, Ana Lilia Sánchez García, Zaira Domínguez, Magali Salas-Reyes, Gustavo Adolfo Castillo Herrera, Inocencio Higuera Ciapara, Ofelia Yadira Lugo Melchor, Motomichi Inoue Noguchi y Claudia Isabel Virués Colorado	083
C36	NUEVO MÉTODO DE SÍNTESIS Y ASIGNACIÓN INEQUÍVOCAS DE LA ESTRUCTURA DE INDOLES 3-ALQUIL-SUSTITUIDOS MEDIANTE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR EN 2D Priscila Janeth Ramírez Gracia, Gabriela A. Sosa Ortiz, Ricardo Tovar Miranda, Tomás Guerrero	084

PRESENTACIONES CARTEL

No. Cartel	Nombre del trabajo y autores	No. página
C37	ACTIVIDAD BIOLÓGICA DE TERPENOS DE <i>Tilia americana</i> EN UN MODELO DE PARKINSON INDUCIDO CON RESERPINA Maribel Osorio-García, Antonio Ruperto Jiménez Aparicio, Maribel Herrera-Ruiz, Alejandro Zamilpa Alvárez, Manasés González-Cortázar	085
C38	DISEÑO, SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN POR RMN DE OXIMAS DERIVADAS DE HECOGENINA Esmeralda Aquino Miguel, Joel Luis Terán, Maricruz Anaya Ruiz, Alan Carrasco Carballo	086
C39	IDENTIFICACIÓN Y PURIFICACIÓN DE COMPUESTOS FENÓLICOS DE <i>TLIA AMERICANA</i> VAR. MEXICANA CON POSIBLE EFECTO NEUROPROTECTOR Gerardo Yael Armas Acosta, Maribel Osorio-García, Alejandro Zamilpa Alvárez, Manasés González-Cortázar	087
C40	Síntesis y caracterización de conjugados etinilestradiol-glucosa Ma. Eugenia Ochoa, Rosa Santillan	088
C41	SULFAMATO DE RESERPINIO, UNA NUEVA FORMA SALINA DEL PRINCIPIO ACTIVO Daniel Alejandro Montes de Oca Maravilla, Diego Martínez Otero	089
C42	DETERMINACIÓN DE LA CONFIGURACIÓN ABSOLUTA DE NUEVOS COMPUESTOS AISLADOS DE <i>ROLDANA SESSILIFOLIA</i> CON POTENCIAL ACTIVIDAD CITOTÓXICA Y ANTIBACTERIANA Hector Viel, Federico del Rio	090

USO DE LA RMN PARA EL ANÁLISIS CONFORMACIONAL DE UN TRITERPENO

Mónica Díaz-Fernández^{a,b}, Karla Cahun-Uicab^a, Viviana Roche-Llerena^a, Leonardo Hernández^a, Geonel Rodríguez-Gattorno^a, Teresa Cortez-Picasso^b, Armando Ariza-Castolo^b, María A. Fernández-Herrera^a

^aDepartamento de Física Aplicada, Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del Instituto Politécnico Nacional, Unidad Mérida. Km 6 Antigua carretera a Progreso. Apdo. Postal 73, Cordemex, 97310, Mérida, Yuc., México.

^bDepartamento de Química, Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del Instituto Politécnico Nacional, Unidad Zacatenco. Avenida Instituto Politécnico Nacional 2508 Colonia San Pedro Zacatenco, 07360, Ciudad de México, México
monica.diaz@cinvestav.mx

Palabras clave: análisis conformacional, hiperconjugación, efecto- γ ,

Introducción. La asignación de los datos de RMN de un compuesto además de ser interesante desde una perspectiva estructural, también permite entender la dinámica y la geometría molecular en solución. La conformación silla observada en ciclohexanos, es susceptible a distorsionarse debido a las interacciones 1,3-sindiaxiales, efecto de hiperconjugación y efecto- γ (1).

Objetivo. Analizar las conformaciones de los cinco ciclos presentes en el triterpeno (Figura 1) mediante diferentes experimentos de RMN.

Metodología. Los espectros de RMN fueron determinados en un espectrómetro JEOL ECA 500 @ 11.74736 T en solución de CDCl_3 .

Resultados y discusión. La asignación de la taraxerona por RMN se realizó por experimentos 1D y 2D. La conformación fue analizada en estado sólido por difracción de rayos X (Figura 1), los ángulos fueron calculados a partir de las constantes de acoplamiento espín-espín y la ecuación HLA tipo Karplus, así como a partir de los confórmeros más estables obtenidos por cálculos DFT, encontrando que el anillo A está preferentemente en conformación silla (86.8%).

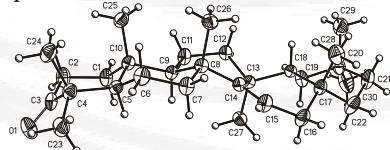


Figura 1. Diagrama ORTEP de taraxerona.

Además, se determinaron espectros de RMN ^1H (Figura 2) a baja temperatura, observándose que a menor temperatura los δ_{H} se desplazan a menor frecuencia; excepto para el H- 2_{ax} el cual se encuentra más desplazado. Lo cual se explica con la hiperconjugación $\sigma_{\text{C}2-\text{H}2_{ax}} \rightarrow \pi^*_{\text{C}4=\text{O}}$. Este efecto también está relacionado con la diferencia entre las $^1J_{\text{CH}}$, siendo aprox. 6 Hz menor para H_{ax} en posición 2 respecto al H_{eq} (Tabla 1), debido a la hiperconjugación denominada efecto Perlin (2). El efecto γ gauche es importante para explicar el δ_{C} de los carbonos 2 ($\Delta\sigma = -6.7$), 6 ($\Delta\sigma = -11.4$) y 11 ($\Delta\sigma = -6.4$), siendo más importante cuando los metilos se encuentran *sinclinales* respecto a la orientación *anti*.

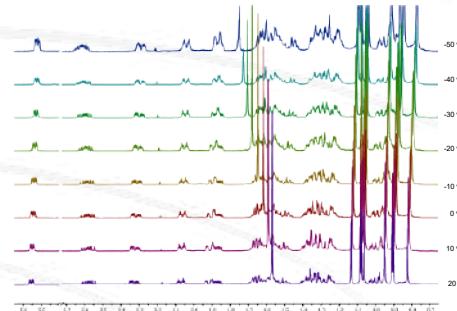


Figura 2. Espectros ^1H NMR a una temperatura de 20 °C a -50°C @ 500.15992 / CDCl_3 .

Tabla 1. Diferencias en desplazamiento químico por unidad de temperatura, constantes de acoplamiento C-H a un enlace y desplazamientos isotopoméricos observados en RMN ^1H .

Posición	VT $\Delta\delta / ^\circ\text{C}$	$^1J_{\text{CH}}^{\text{a}}$ (Calc) ^b	$^1\Delta^{12/13}\text{C}(\text{H})^{\text{c}}$
H-1 _{ax}		126.93	130.91
H-1 _{eq}	0.13	125.86	134.56
H-2 _{ax}	-0.53	124.96	128.53
H-2 _{eq}	0.56	130.87	136.55
H-7 _{ax}		123.98	130.70
H-7 _{eq}	0.44	126.93	131.46
H-9 _{ax}		121.52	126.59
H-15	0.47	155.1	161.18
H-16 _{ax}	0.68	130.1	130.72

^aObtenidos del experimento HSQC no desacoplado; ^bCalculado usando GIAO B3LYP/6-311G(d,p); ^cexpresado en ppb; ^dDR: resolución digital.

Conclusiones. Se demostró la importancia de evaluar la contribución de los dos confórmeros para explicar la relación de las $^3J_{\text{HH}}$ con los ángulos torsionales. Los efectos γ y de hiperconjugación permiten explicar el desplazamiento químico, las $^1J_{\text{CH}}$ y $^1\Delta^{12/13}\text{C}(\text{H})$.

Agradecimientos. Al SECIHTI por el proyecto CF-2025-I-428 y la beca (473101) otorgada a M.D.F.

Referencias.

- O. Takahashi, K. Yamasaki, Y. Kohno, Y. Kurihara, K. Ueda, Y. Umezawa, H. Suezawa, M. Nishio, *Tetrahedron* 2008, **64**, 2433–2440.
- A.S. Perlin, B. Casu, *Tetrahedron Lett.* 1969, **10**, 2921–2924.

CONDUCTA SINGULAR DE COPOLIMEROS AB DIBLOCK EN DOSY

Gerardo Cedillo Valverde^{1,2*}, René Salgado Delgado¹, Areli Marlen Salgado Delgado¹, Alfredo Olarte Paredes¹, Salvador López Morales² y Manuel García Hipólito²

¹Tecnológico Nacional de México/Instituto Tecnológico de Záratepec, Calzada Tecnológico No.27, Col. Centro, Záratepec Morelos, México. ²Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México, Circuito Exterior s/n, Ciudad Universitaria, 04510, Coyoacán, Ciudad de México. 55 5622 4715

gcedillo@materiales.unam.mx

Palabras clave: Copolímeros de bloque, Sonoquímica, Espectroscopía de difusión ordenada.

Introducción.

Se sintetizaron copolímeros de bloque (CPB) a partir de polímeros de desecho, empleando ultrasonido (US) como catalizador de la reacción. Se han sintetizado diferentes copolímeros estireno-metil metacrilato (PS-co-MMA) (1), los cuales a nivel molecular presentan diferencias, ¹H-RMN es sensible para observarlas (2). Sin embargo, en el caso de los CPB los espectros son idénticos a una mezcla de polímeros, por lo que es necesario realizar DOSY (espectroscopía de difusión ordenada) para corroborar la formación de copolímero (3), no obstante, en nuestro caso se presentan dos constantes de difusión (D) pero la cromatografía de exclusión de tamaños (HPLC-SEC) indica que tenemos una sola distribución de peso molecular (M_n).

Diferentes variables están involucradas en la reacción: concentración, relación de polímeros, frecuencias US (f), M_n , tiempo de reacción y solventes.

Objetivo.

Mostrar que los CPB diblock **AB** son una excepción en DOSY, que cada bloque muestra una D distinta a diferencia de otros copolímeros.

Metodología.

Se emplearon tres f , a saber: 42, 800 y 1700 kHz, la concentración fue de 50 mg/ml, la relación PS/PMMA: 20/80, 1 hora de reacción y dos solventes: cloroformo y tolueno. Se utilizaron polímeros de diferentes M_n : $PS_{MM}= 103$ kDa, $PS_{AM}= 1337$ kDa, $PMMA_{BM}= 52$ kDa y $PMMA_{MM}= 94$ kDa. Los CPB fueron purificados con acetona y una mezcla 50% V/V MEC/Isopropanol.

Se usó un espectrómetro Bruker Avance III HD 400, sonda BBI 400MHz 5mm with z-gradients, secuencia *stebpgr1s* a T=21.5°C, software TopSpin 3.5 y Dynamics Center 2.3.

Resultados y discusión.

Diferentes proporciones PS/PMMA fueron sintetizadas, todos presentaron dos perfiles de difusión y una o hasta tres distribuciones en el M_n , todos fueron polidispersos (Figura 1a y 1b). El sistema $PS_{MM}-b-PMMA_{BM}$ es el que presentó solo una distribución bajo todas las condiciones, $PS_{MM}-b-PMMA_{MM}$ solo a 1700 kHz, $PS_{AM}-b-PMMA_{BM}$ y $PS_{AM}-b-PMMA_{MM}$ a 800 y 42 kHz respectivamente, en tolueno.

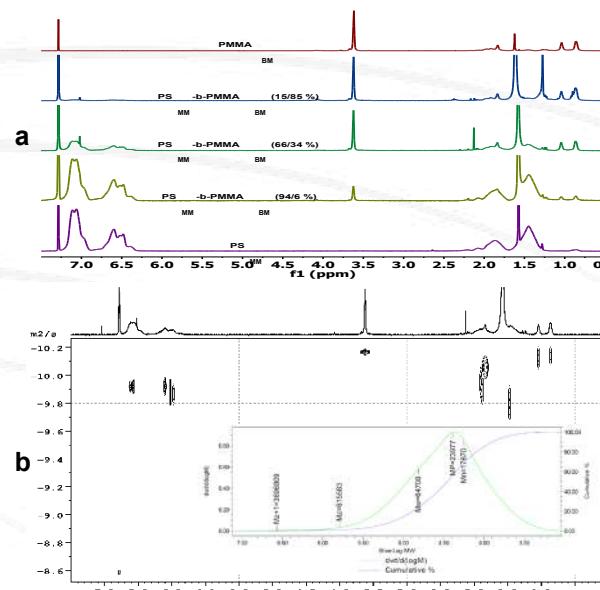


Figura 1. Espectros ¹H-RMN en CDCl₃ de CPB de diferentes proporciones (a), Espectro DOSY de $PS_{MM}-b-PMMA_{BM}$ de composición 66/34% y su distribución M_n (recuadro) (b).

Conclusiones.

En los CPB, los sistemas **AB** diblock son un caso particular, solo hay una unión covalente que es de mínima influencia en relación a ambos lados del copolímero, resultando en dos difusiones, ello no es observado en copolímeros **PS-co-MMA** sintetizados al azar. Bajo estas condiciones de síntesis, el M_n inicial es la variable a tomar en cuenta para tener una o más distribuciones, la f y el solvente también influyen.

Agradecimientos. Por su apoyo técnico a: M. A. Canseco M., C. González S., O. A. Pompa G., F. Silvar G., A. K. Bobadilla V., O. L. Jiménez Á., O. A. Luna C. y J. Negrete H.

Referencias.

- Odian G., *Principles of Polymerization*, 4th Ed., John Wiley & Sons, Inc., New Jersey, The United States of America, 2004, pp 464-510.
- Bovey F. A. & Mirau P. A, *NMR of Polymers*, Academic Press Inc., California, The United States of America, 1996, pp 117-139, 185-189.
- T. S. Jiménez-Martínez, S. Romero-Manig, N. Esturau-Escofet, M. Briseño-Terán, *J. Mex. Chem. Soc.* 2011, **55**(2), 101-104.

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN POR RMN DEL BENZOATO DE LA OXIMA DERIVADA DE LA COLESTANONA

Joseph F. Almazan-Escamilla¹, Guiee Niza Lopez-Castillo², David M. Aparicio-Solano³, Yazmin Gómez-Gómez¹, Jorge Organista-Nava¹, Berenice Illades-Aguiar¹, Marco A. Leyva-Vázquez¹ Alan Carrasco-Carballo².

¹Laboratorio de Biomedicina Molecular, FCQB, UAGro, Guerrero, 39087, México.

²Laboratorio de Elucidación y Síntesis en Química Orgánica, CQ, ICUAP, BUAP, Puebla, 72570, México.

³Centro de Química, ICUAP, BUAP, Puebla, 72570, México.
13387445@uagro.mx

Palabras clave: Colestanona, Oxima, Cáncer.

Introducción. La alta toxicidad de los fármacos utilizados en los pacientes con cáncer ha impulsado la búsqueda de nuevos compuestos con actividad antitumoral y alta selectividad a blancos moleculares, con el objetivo de mejorar la calidad de vida de los pacientes (1, 2). Actualmente, las oximas derivadas de la colestanona son un nuevo campo en la investigación para el tratamiento del cáncer estos compuestos químicos actúan como agentes citotóxicos al unirse a proteínas blancos e inhibir su función, mostrando resultados favorables en estudios *in vitro* (3).

Objetivo. Sintetizar y caracterizar por RMN el benzoato de la oxima derivada de la colestanona.

Metodología. Ruta de síntesis de Bz-O-Oxima de Colestanona (Figura 1).

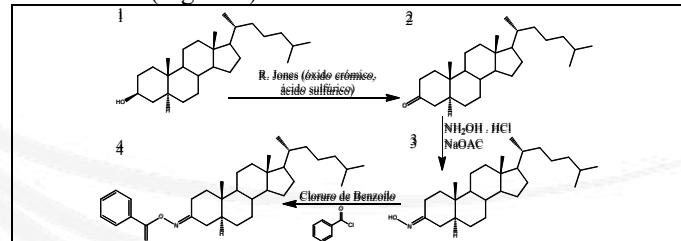


Figura 1. Ruta de síntesis de la oxima derivada de la colestanona, Bz-O-Oxima de Colestanona.

Resultados y discusión. A partir del colestanol (Figura 2a) se puede observar la presencia de la señal en H-3 derivada del efecto del hidroxilo en dicho carbono, así como las señales de los metilos en baja frecuencia, al momento de oxidar la señal de H-3 desaparece (Figura 2b), así como las señales en 2.2 ppm que corresponden a los H-2 y H-4, al proceder a la obtención de la oxima el espectro de ¹H no sufre un cambio significativo salvo la aparición de una señal 9.15 ppm correspondiente al hidroxilo de la oxima (Figura 2c), quien no se intercambia con deuterio debido a su poco carácter acido, posteriormente, al momento de realizar la esterificación esta señal desaparece, para dar lugar a 3 señales correspondientes al anillo aromático del benzoato (Figura 2d), esto fue corroborado por RMN de ¹³C, así como la esterificación vía

HMBC detectando la correlación entre el carbonilo del éster y H-2 y H-4.

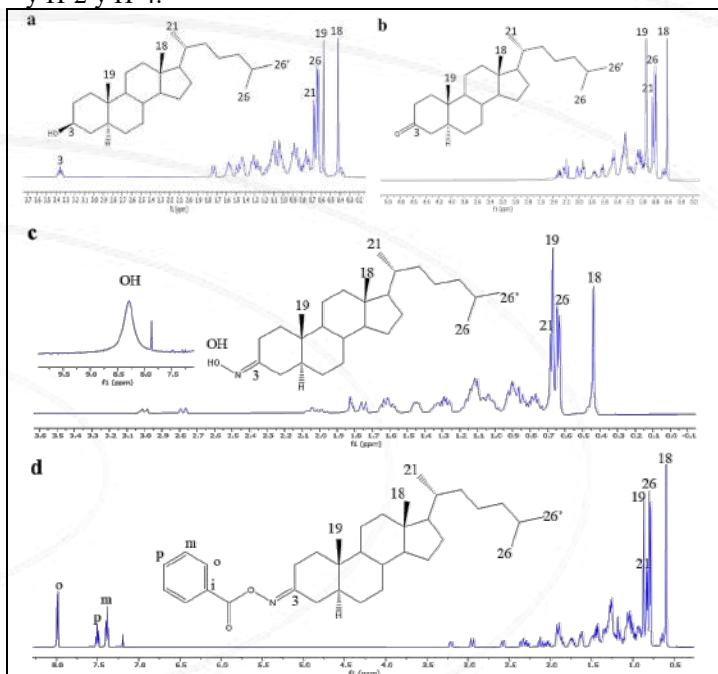


Figura 2. Espectros de RMN-¹H a 500 MHZ: a) Colestanol, b) Colestanona, c) Oxima de Colestanona d) Bz-O-Oxima de Colestanona.

Conclusiones. La RMN de ¹H y ¹³C permite la correcta caracterización de modificaciones puntuales en la semi-síntesis de esteroides en particular de oximas esteroidales, ya que estas presentan un bajo carácter acido dando lugar a una señal característica de su grupo hidroxilo dando pauta a la detección de modificaciones sobre este grupo.

Referencias.

1. H. Fang-Liang, L. En-Chih, L. Chia-Ling, Y. Chung Yang, Y. Sheng Jie, *Oncol. Lett.* 2020, **20**, 448-454.
2. Herrmann, *Nat. Rev. Cardiol.* 2020, **17**(8), 503-522.
3. A. R. Gomes, A. S. Pires, F. M. F. Roleira, E. J. Tavares-da-Silva, *molecules*. 2023, **28**(4), 1690.

SÍNTESIS DE UN [5,5] ESPIROCICLO DERIVADO DE LA D-GLUCOSA VÍA CATÁLISIS FOTOREDOX

Ninotchka Tapia Arenas^a, Leonardo Xochicale Santana^b, Fernando Sartillo Piscil^b, Omar Cortezano Arellano^a, Instituto de Ciencias Básicas de la Universidad Veracruzana^a, Av. Castelazo Ayala Sn, Industrial Ánimas, 91192 Xalapa-Enríquez, Ver., 2288418931, nino7169@gmail.com.

Palabras clave: *D-glucosa, espirociclos, fotocatálisis.*

Introducción. Los espirocetales son núcleos estructurales compuestos por dos heterociclos de oxígeno que se encuentran unidos por un solo átomo de carbono. De manera puntual los [5,5] y [5,6] espirocetales se muestran como subunidades en una amplia variedad de productos naturales biológicamente activos. Debido al rol estructural que juegan los espirociclos en una infinidad de productos naturales bioactivos, la comunidad científica se ha enfocado hacia la síntesis de este tipo de metabolitos. Con base a lo anterior, nuestro grupo de investigación se ha interesado en el desarrollo de nuevas metodologías sintéticas para la preparación estereoselectiva de este tipo de núcleos estructurales (1, 2).

Objetivo. Sintetizar un [5,5] espirociclo partiendo de un derivado de D-glucosa vía catálisis fotoredox y determinar la relación diastereomérica mediante experimentos de ¹H y ¹³C.

Metodología. Partiendo de la D-glucofuranosa como materia prima 1 se contempló llevar a cabo la introducción del grupo *N*-ftalimido mediante la reacción de Mitsunobu seguido de la reacción de fosforilación. Una vez teniendo el aducto 5C, se procedió a la formación del radical catiónico para la construcción del núcleo [5,5] espirocetálico correspondiente mediante el proceso de fotocatálisis (Figura 1). Cada aducto obtenido se caracterizó mediante el uso de RMN específicamente de ¹H y de ¹³C.

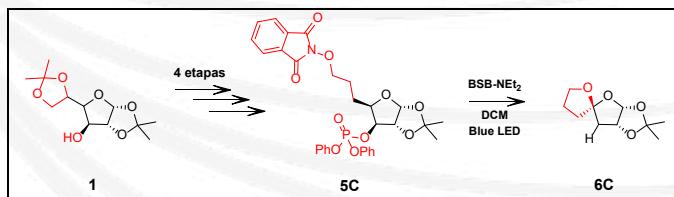


Figura 1. Síntesis del espirociclo 6C partiendo de un derivado de la D-glucosa 1.

Resultados y discusión. El modelo radicalario para la construcción estereoselectiva de [5,5] espirocetales ha sido ampliamente estudiado por nuestro grupo de investigación utilizando reactivos de estaño o con metales de transición como el Iridio. Debido a lo anterior, nos enfocamos en realizar pruebas de espirociclación con derivados de boro y bases de Schiff llamados BOSHIBAs, ya que presentan baja toxicidad y son económicos (3). En la figura 2 y 3 se muestran los espectros del espirociclo mayoritario empleando esta alternativa libre de estaño y de metales de transición.

11^a Reunión de Resonancia Magnética Nuclear Experimental, Instituto de Ciencias Básicas, Universidad Veracruzana, Xalapa, 28 y 29 de agosto de 2025

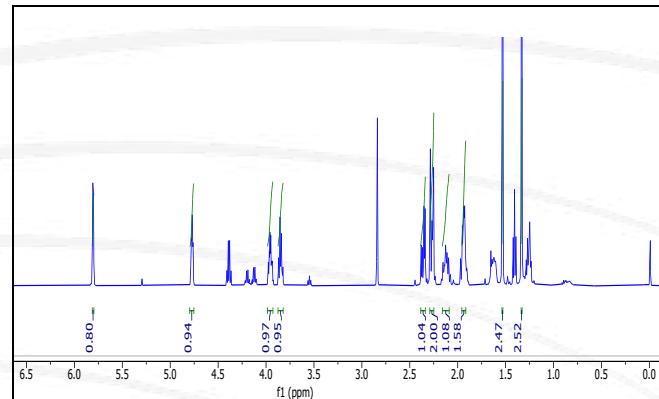


Figura 2. ¹H RMN (500 MHz, CDCl₃)

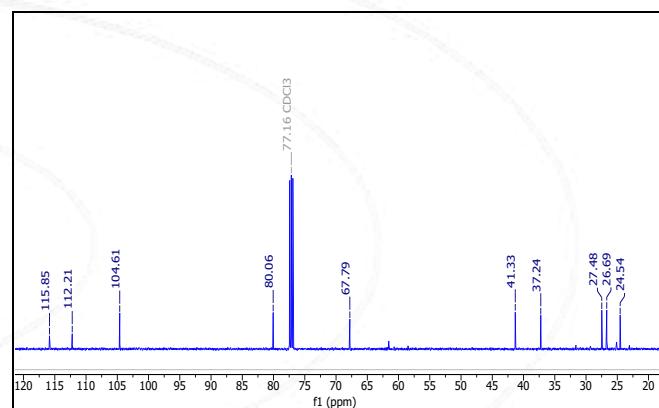


Figura 3. ¹³C RMN (126 MHz, CDCl₃)

Conclusiones. A través de la RMN tanto de ¹H como de ¹³C se pudo determinar la relación diastereomérica (5:1) del espirociclo siendo más contundente la señal del carbono cuaternario por mostrar un desplazamiento diferente.

Agradecimientos. Al Instituto de Ciencias Básicas de la UV y al Laboratorio de Síntesis Orgánica FCQ8 de la BUAP.

Referencias.

- O. Cortezano-Arellano, L. Quintero, F. Sartillo-Piscil, *J. Org. Chem.* 2015, **80**(5), 2601-2608.
- L. Xochicale-Santana, O. Cortezano-Arellano, B.A. Frontana-Uribe, V.M. Jiménez-Pérez, F. Sartillo-Piscil, *J. Org. Chem.* 2023, **88**(7), 4880-4885.
- J.A. Lara-Cerón, V.M. Jiménez-Pérez, L. Xochicale-Santana, M. E. Ochoa, A. Chávez-Reyes, B.M. Muñoz-Flores, *RSC Advances.* 2020, **10**(53), 31748-31757.

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE NUEVAS SALES DE 3-(METIL/HIDROXI/3ACETIL)-PIRIDINIO DERIVADAS DE ACETATO DE ALLOPREGNANOLONA.

Olga Hisami Rodríguez Matsui¹, Elena Hernández-Caballero², Joel L. Terán³, Alan Carrasco-Carballo^{1*}

¹Laboratorio de Elucidación y Síntesis en Química Orgánica, CQ, ICUAP, BUAP, Puebla, México.

²Facultad de Medicina, Biomedicina, BUAP, Puebla, México.

³Centro de Química, ICUAP, BUAP, Puebla, México.

col538941@colaborador.buap.mx

Palabras clave: allopregnanolona, sal de piridinio, bioconjugados.

Introducción. La bioconjugación de los esteroides con otras moléculas biológicamente activas puede resultar en un incremento de la hidrofilia, estabilidad y especificidad (1). En este sentido la allopregnanolona es un esteroide neuroactivo, que se caracteriza por poseer una diversidad de aplicaciones terapéuticas (2). Por otra parte, existen otras estructuras bioactivas como las sales de piridinio que exhiben actividad biológica benéfica principalmente antimicrobiana, anticancerígena y antimarial (3), volviendo de interés la síntesis y caracterización de estos.

Objetivo. Sintetizar y caracterizar a través de RMN de ¹H y ¹³C nuevas sales de piridinio esteroidales a partir del acetato de allopregnanolona y diversas piridinas 3-sustituidas (figura 1).

Metodología.

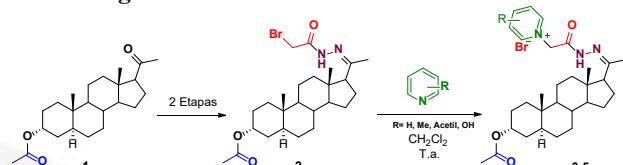


Figura 1. Síntesis de sales de piridinio derivadas del acetato de allopregnanolona.

Resultados y discusión. La síntesis consistió en hacer reaccionar el acetato de allopregnanolona 1 con $\text{NH}_2\text{NH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ en EtOH, para reaccionar de manera *in situ* con bromuro de bromoacetilo accediendo al compuesto 2 con un rendimiento del 90% después de dos etapas. Con la haloamida 2 en mano se realizaron diferentes experimentos con el propósito de obtener sales de piridinio 3-(metil/hidroxi/acetyl)-sustituidas, empleando CH_2Cl_2 como disolvente y a temperatura ambiente (tabla 1).

Tabla 1. Síntesis de nuevas sales de piridinio derivadas del acetato de allopregnanolona 1.

Exp.	Nucleófilo	Tiempo	Rdto (%)
1	Piridina	5 minutos	(3) 80%
2	3-Metilpiridina	4 horas	(4) 68%

3	3-Hidroxipiridina	42 horas	(5) 41%
4	3-Acetilpiridina	27 horas	(6) 45%

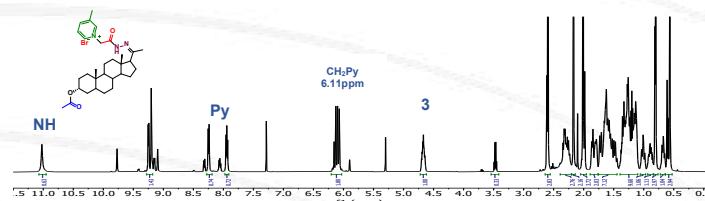


Figura 2. RMN-¹H (CDCl₃, 500 MHz) de la sal de piridinio 4.

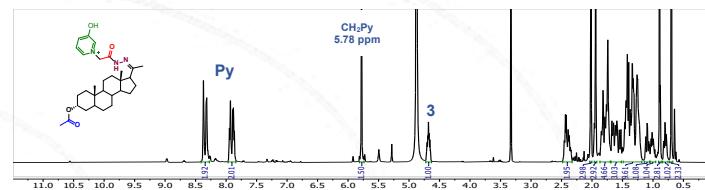


Figura 3. RMN-¹H (MeOD, 500 MHz) de la sal 5.

Las señales características de las sales de piridinio obtenidas son las que observamos en aproximadamente 6.11 ppm para la sal 4 (figura 2), y 5.78 ppm de la sal 5 (figura 3) que corresponden al metíleno que se encuentra unido directamente a la piridina. Además, es importante mencionar que las sales 3 y 4 presentan equilibrio rotamérico correspondientes a los confórmeros de la amida *E* y *Z*.

Conclusiones.

Se sintetizaron nuevos bioconjugados esteroidales derivados del acetato de allopregnanolona y diferentes piridinas 3-sustituidas con buenos rendimientos químicos, además gracias a la RMN de ¹H y ¹³C se lograron identificar y caracterizar a los nuevos compuestos obtenidos.

Referencias.

- R. Bansal, A. Suryan, *ACS Bio Med Chem Au* 2022, **2**(4), 340–369.
- S. Diviccaro, L. Cioffi, E. Falvo, S. Giatti, R. C. Melcangi, *J. Neuroendocrinol.* 2022, **34**(2), e12996.
- S. Sowmiah, J. M. S. S. Esperança, L. P. N. Rebelo, C. A. M. Afonso, *Org. Chem. Front.* 2018, **5**(3), 453–493.

EL USO DE LA RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DE PROTÓN EN LA BÚSQUEDA DE LÍPIDOS BIOACTIVOS (OMEGA-3): ESTUDIO DE CASO

Dendropogonella rufescens (Bryophyta: Cryphaeaceae).

Néstor Emanuel Hernández Vidal, Holber Zuleta Prada*, Diana Guerra Ramírez, Diana Becerra Morales y Salvador Valle Guadarrama.

Posgrado en Ciencia y Tecnología Agroalimentaria, Departamento de Ingeniería Agroindustrial, Universidad Autónoma Chapingo. Texcoco. Estado de México. 9532090433.

emahernanv@gmail.com

Palabras clave: omega-3, musgos, lípidos

Introducción. Los ácidos grasos omega-3 poseen reconocidas propiedades neuroprotectoras, cardioprotectoras, antiinflamatorias y potenciales efectos en la prevención del cáncer (1). Su obtención depende principalmente de fuentes marinas, amenazadas por la contaminación, la sobrepesca y el cambio climático. Esto ha impulsado la búsqueda de fuentes alternativas y de técnicas analíticas rápidas y precisas para su detección, como la resonancia magnética nuclear de protón (¹H RMN). Los musgos (2), en particular *Dendropogonella rufescens* que además es un musgo utilizado en la etnomedicina tradicional en las comunidades zapotecas (3) representan un grupo poco explorado con potencial como fuente de lípidos bioactivos.

Objetivo. Caracterizar el perfil lipídico de *D. rufescens* mediante ¹H RMN, identificando desplazamientos químicos asociados a triacilgliceroles y omega-3, y confirmar su presencia mediante cromatografía de gases (GC-FAME).

Metodología. A partir de 1 kg de *D. rufescens* deshidratado se maceró con metanol (16 L, 4 días, temperatura ambiente) para obtener un extracto metanólico, del cual se realizó una partición clásica con hexano (L/L, 1:1, v: v). La fracción lipídica se purificó por cromatografía ultrarrápida (Hexano-AcOEt) y se analizó por ¹H RMN 400 MHz (CDCl₃, TMS como referencia interna). Las muestras de aceite se sometieron a esterificación con H₂SO₄ al 5 % en MeOH a reflujo, seguida de una transesterificación con KOH al 0,7 %. Los ésteres metílicos finales se extrajeron con hexano, se secaron con sulfato de sodio y se almacenaron a 4 °C hasta su análisis.

Resultados y discusión. El espectro ¹H RMN del aceite analizado el cual se muestra en la Figura 1 mostró señales características de triacilgliceroles: 5.35 ppm (hidrógenos vinílicos, sp²), 4.0–4.4 ppm (protones del glicerol) y 2.3 ppm (hidrógenos α al carbonilo). Destacó una señal intensa a 0.97 ppm, atribuida a los grupos metilo terminal de ácidos grasos omega-3, ausente en la mayoría de las especies terrestres y consistente con reportes de fuentes marinas (4). El análisis GC-FAME determinó un contenido de 14.4% de omega-3 en el aceite.

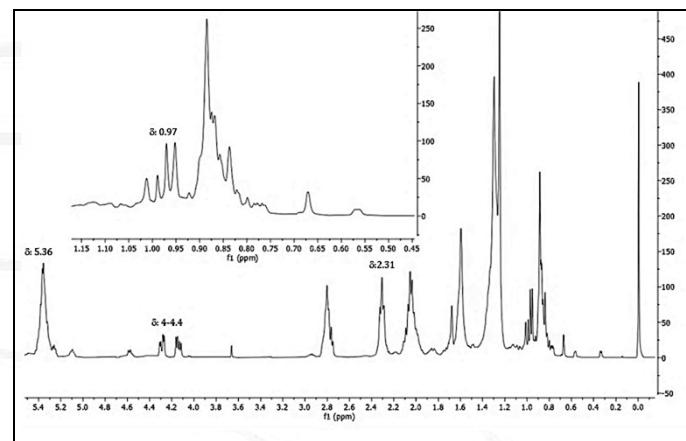


Figura 1. Espectro de RMN ¹H de 400 MHz del aceite de *D. rufescens*, y su señal a 0,97 ppm correspondiente a omega-3.

Conclusiones. *D. rufescens* presenta un perfil lipídico rico en omega-3, confirmado por ¹H RMN y GC-FAME, lo que respalda su potencial como fuente nutracéutica alternativa. Este hallazgo amplía el conocimiento sobre briofitas como reservorios de lípidos bioactivos y refuerza el uso de ¹H RMN como herramienta rápida para su detección.

Agradecimientos. A la SECIHTI por la beca de manutención de maestría Referencia 001451 (CVU 1308784) y a la Universidad Autónoma Chapingo (Proyectos 24176-C-90 y 25073-C-90)

Referencias.

1. Punia, S., Sandhu, K.S., Siroha, A.K., Dhull, S.B., 2019. Omega 3-metabolism, absorption, bioavailability and health benefits—A review. *PharmaNutrition* **10**, 100162.
2. Lu, Y., Eiriksson, F.F., Thorsteinsdóttir, M., Simonsen, H.T., 2019. Valuable fatty acids in bryophytes—Production, biosynthesis, analysis and applications. *Plants* **8**, 524.
3. Hernández-Rodríguez, E., López-Santiago, J., 2021. Uses and traditional knowledge of *Dendropogonella rufescens* (Bryophyta: Cryphaeaceae) in a Zapotec community of southeastern Mexico. *Bot. Sci.* **100**(1), 153–168.
4. Williamson, M.P., Hatzakis, E., 2017. Nuclear magnetic resonance (NMR) in lipid analysis: Applications and advancements. *TrAC Trends Anal. Chem.* **93**, 58–73.

SÍNTESIS MODULAR DE SALES DICATIÓNICAS DE 1,2,3-TRIAZOLIO Y SU UTILIZACIÓN PARA LA FORMACIÓN DE COMPLEJOS HETEROBIMETÁLICOS.

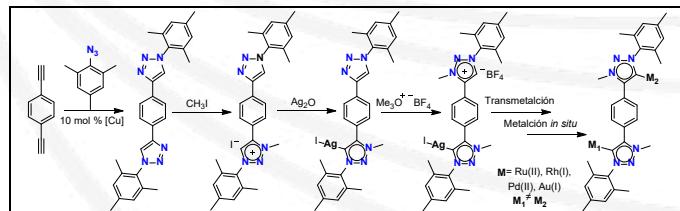
Francisco Javier Ruiz Mendoza*, Emmanuel Campos Domínguez, Daniel Mendoza Espinosa, Área Académica de Química, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, Carretera Pachuca Tulancingo Km. 4.5, Mineral de la Reforma, Hidalgo 42090, México. Tel: 7711657520, e-mail: francisco_ruiz@uaeh.edu.mx, daniel_mendoza@uaeh.edu.mx

Palabras clave: carbenos mesoiónicos, sal de 1,2,3-triazolio, complejos heterobimétalicos.

Introducción. Los carbenos N-heterocíclicos, específicamente los carbenos mesoiónicos son utilizados por la gran versatilidad en su modificación estructural que se obtiene tras la funcionalización de un bloque de construcción de interés; también hay que considerar que la alta donación sigma y aceptación pi influencian las propiedades y reactividad de sus respectivos complejos metálicos (1). El diseño de ligantes bidentados con espaciadores fenileno basados en 1,2,3-triazolilidenos es de interés para la construcción gradual de complejos heterobimétalicos puesto que confieren propiedades electrónicas y estructurales únicas.

Objetivo. Sintetizar complejos heterobimétalicos empleando funcionalización selectiva y secuenciada de sales dicatiónicas de 1,2,3-triazolio.

Metodología. La síntesis gradual de la sal dicationica de 1,2,3-triazolio comienza por la reacción de cicloadición [3+2] alquino-azida catalizada por Cu, empleando como precursor el 1,4-dietinilbenceno. Posteriormente se cuaternariza uno de los anillos de triazol utilizando selectivamente los equivalentes de yodometano, obteniendo la sal de triazolio-triazol $[(\text{Trz})\text{Ph}(\text{TrzH})]\text{I}$, el tratamiento del ligante con exceso de óxido de plata permite la preparación directa del complejo de plata $[(\text{Trz})\text{Ph}(\text{MIC}\cdot\text{AgI})]$. Una segunda cuaternarización con la sal de Meerwein permite la formación del complejo-ligante de tipo $[(\text{TrzH})\text{Ph}(\text{MIC}\cdot\text{AgI})]\text{BF}_4^-$, el cual puede ser utilizado como agente de transmetalación y una sucesiva metalación *in situ* permitirá la formación de complejos heterobimétalicos con un alto valor agregado (Esquema 1).



Esquema 1. Síntesis de complejos heterobimétalicos con metales de transición.

Resultados y discusión. La caracterización completa mediante RMN de ^1H y ^{13}C muestra la formación del precursor de bis-1,2,3-triazol simétrico con un patrón de

sustitución 1,4 en el espaciador. En el análisis de los espectros de ^1H para la sal de tipo triazolio-triazol $[(\text{Trz})\text{Ph}(\text{TrzH})]\text{I}$ se muestra un patrón asimétrico para los fragmentos de mesitilo, así como la señal característica de triazol en 8.09 ppm y para el protón ácido de triazol en 9.15 ppm (Figura 1), con dichas funcionalizaciones se observa cómo cambia la simetría de la molécula permitiendo así la identificación de cada uno de los productos.

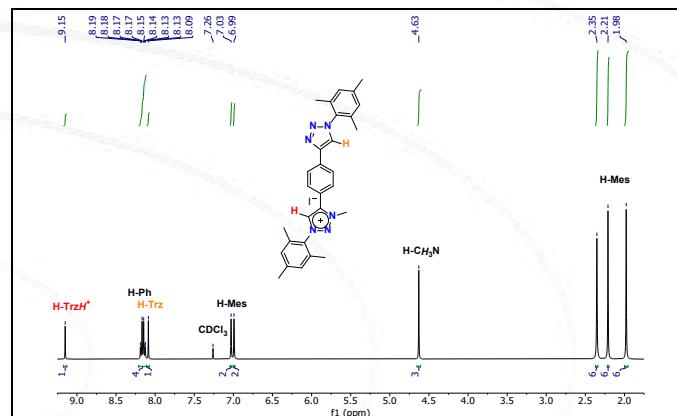


Figura 1. Espectro de RMN de ^1H (400 MHz) de la sal de triazolio-triazol $[(\text{Trz})\text{Ph}(\text{TrzH})]\text{I}$ en CDCl_3 .

Conclusiones. La funcionalización gradual del 1,4-dietinilbenceno permite la formación de un bloque de construcción relevante para la obtención de complejos heterobimétalicos con metales de transición de los grupos 8 a 11, el proceso de síntesis es factible al obtener de manera directa los productos de interés tomando en cuenta los efectos estéreo-electrónicos y proporciones estequiométricas que se ven involucrados en el sistema, siendo esta ruta sencilla y rápida que se puede explorar.

Agradecimientos. Este trabajo se realizó en el Área Académica de Química de la Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo en colaboración con el Dr. Daniel Mendoza Espinosa.

Referencias.

1. Fonseca-Olvera, J. G.; Ruiz-Mendoza, F. J.; Flores-Ávila, A.; Meléndez-Rodríguez, M.; Suárez-Castillo, O. R.; Mendoza-Espinosa, D. *Eur. J. Inorg. Chem.* 2024, **27**, e202400145.

EFFECTO DINÁMICO EN RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR: ANÁLISIS CONFORMATACIONAL DEL ANHÍDRIDO OXIDIFTÁLICO

Cielo Domínguez-Leal, Hilda Barquín-Ledesma, Paul Mitchell Paredes-Hernández, Ma. Remedios Mendoza-López, Oscar García-Barradas*

Instituto de Química Aplicada, Universidad Veracruzana, Luis Castelazo Ayala s/n, Col. Industrial ánimas, 91190, Xalapa, Veracruz, 2288428916, osgarcia@uv.mx

Palabras clave: anhídrido oxidiftálico, efecto dinámico, análisis conformacional.

Introducción. La espectroscopía por Resonancia Magnética Nuclear (RMN) es una herramienta eficiente e indispensable en el área de la síntesis orgánica para llevar a cabo la elucidación de compuestos.(1) Tales compuestos pueden presentar “efectos dinámicos”, los cuales son ciertos movimientos de rotación (cambios en la conformación) o intercambios intermoleculares que pueden ser perceptibles en el espectro.(2) El análisis del efecto dinámico del anhídrido oxidiftálico permite obtener una caracterización precisa del compuesto y abre la puerta a aplicaciones más controladas y eficientes en síntesis química.

Objetivo. Determinar las conformaciones de mínima energía del anhídrido oxidiftálico (AO) mediante mecánica molecular (MMX) y obtener la conformación más estable relacionada con los datos experimentales de RMN ^1H .

Metodología. Se obtuvieron los espectros de RMN ^1H del anhídrido oxidiftálico a 25 y 90 °C empleando un equipo Agilent Technologies de 500 MHz, modelo DD2, disueltos en DMSO- d_6 para observar los cambios aparentes en las señales. Posteriormente, con ayuda del software PC Model v9.20, se realizaron cálculos de mecánica molecular en fase gas para obtener la conformación de mínima energía y analizar los datos obtenidos.

Resultados y discusión. En la Figura 1 se muestra el espectro del anhídrido oxidiftálico a 25 y 90 °C. A temperatura ambiente, se observa una mayor cantidad de bandas de las esperadas de acuerdo con la estructura bidimensional.

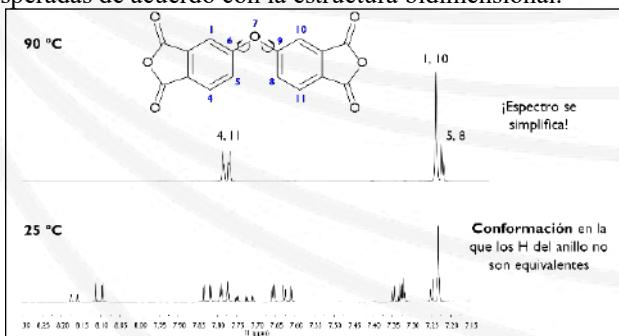


Figura 1. Espectro de RMN ^1H a 25 y 90 °C (500 MHz) de anhídrido oxidiftálico en DMSO- d_6 .

Al aumentar la temperatura, aumenta la velocidad en que la molécula se interconvierte en sus diversas conformaciones,

obteniéndose así un promedio de los desplazamientos químicos de los protones. Para el cálculo de las conformaciones más estables se consideraron dos ángulos diedros, D1 y D2. Se obtuvieron las superficies de energía potencial (Figura 2) y de probabilidad poblacional conformacional (Figura 3).

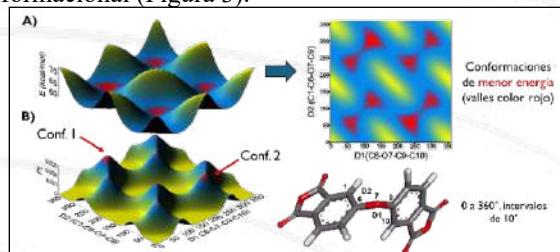


Figura 2. A) Superficie de energía potencial. B) Superficie de probabilidad poblacional conformacional.

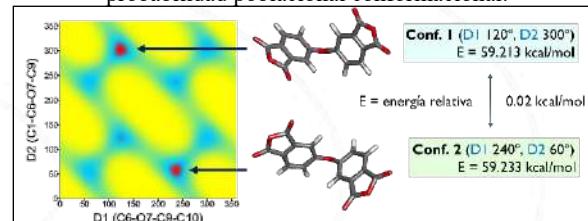


Figura 3. Superficie de probabilidad poblacional conformacional (vista desde arriba).

Conclusiones. Los confórmeros más estables presentados son aquellos en donde los anillos aromáticos unidos al oxígeno se acomodan de manera casi perpendicular uno respecto al otro, lo que disminuye la repulsión entre los hidrógenos. Este resultado podría explicar la aparición de una gran cantidad de bandas en RMN ^1H a temperatura ambiente, pese a la simetría inicial de la molécula. Asimismo, permiten conocer la temperatura ideal para elucidar derivados del anhídrido oxidiftálico. Para mayor exactitud, se sugiere realizar el estudio teórico considerando el disolvente utilizado.

Agradecimientos. A la SECIHTI por el apoyo de la beca 4036249 y a la Q.C. Guadalupe Adriana Vásquez Reyes por la obtención de los espectros de RMN.

Referencias.

- O. Socha, Z. Osifová, M. Dračínský, *J. Chem. Educ.* 2023, **100**, 962–968.
- M. M. Zanardi, M. O. Marcarino, A. M. Sarotti, *Energeia*, 2021, **17**, 1668-1622.

SÍNTESIS Y ELUCIDACIÓN DE DIPÉPTIDOS CATIONÍNICOS

Zurysadai Corrales Ocampo*, Lemuel Pérez Picaso, Miguel Ángel Peña Rico, Omar Viñas Bravo, Roxana Martínez Pascual y Adolfo López Torres.

Centro de Investigaciones Científicas, Instituto de Química Aplicada, Universidad del Papaloapan, Circuito Central 200, Col. Parque Industrial, Tuxtepec, Oax. 68301. zurycorrales25@gmail.com

Palabras clave: dipéptidos catiónicos, elucidación, N-alquilación.

Introducción. Diversos péptidos de cadena corta presentan actividades biológicas importantes como agentes anticancerígenos, antifúngicos y antiproliferativos (1). Los péptidos catiónicos han cobrado relevancia debido a su afinidad con las membranas lipofílicas de células cancerosas (2). En el presente proyecto se sintetizaron y elucidaron dos dipéptidos catiónicos de sales de amonio.

Objetivo. Elucidar dipéptidos catiónicos sintetizados a partir de una *N*-alquilación.

Metodología. En un matraz de bola de 100 mL con un agitador magnético, se colocó la α -bromoamida (**1**, **2**; 1.00 mmol) en CH₃CN (7.2 mL), posteriormente se agregó la piridina (1.1 mmol) en una sola porción. La mezcla de reacción se dejó en agitación por 24 h a temperatura ambiente. Al terminar la reacción se evaporó el disolvente y se extrajo con DCM (20 mL) y H₂O (2x10 mL). Los productos de reacción se caracterizaron por RMN, colocando 0.050g/0.5 mL de D₂O en un tubo de RMN, empleando un equipo Spinsolve 80 de la marca Magritek (80 MHz para ¹H y 20 MHz para ¹³C). Los espectros obtenidos se procesaron en el programa MestReNova.

Resultados y discusión. Los dipéptidos catiónicos se sintetizaron mediante una *N*-alquilación de la piridina con una α -bromoamida derivada de los ésteres de valina y fenilalanina (Figura 1). La *N*-alquilación de piridina con el BrAcPheOMe (**1**) en acetonitrilo produjo el dipéptido catiónico **3** con un rendimiento del 86 %, por otro lado, la *N*-alquilación de piridina con BrAcValOMe (**2**) dio como resultado el dipéptido catiónico **4**, con un rendimiento de 88 %. Los dipéptidos catiónicos fueron solubles en agua, por lo cual se optó por disolver las muestras en D₂O, y sus estructuras se determinaron con base en experimentos de RMN de 1D y 2D.

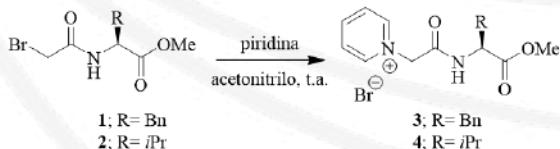


Figura 1. Síntesis de los dipéptidos catiónicos **3** y **4**.

Para los dipéptidos catiónicos **3** y **4** las señales de los espectros de RMN de ¹H y ¹³C fueron las siguientes (Figura 2): los protones del residuo de glicina se observan como una señal simple amplia con $\delta_H=5.48$ ($\delta_C=61.6$) para **3**, mientras

que en el compuesto **4** se presenta como una señal simple $\delta_H=5.69$ ($\delta_C=61.7$). Los metilos del grupo éster en los dipéptidos **3** y **4** se presentan como señales simples con $\delta_H=3.85$ ($\delta_C=53.1$) y $\delta_H=3.81$ ($\delta_C=52.9$), respectivamente. El protón α de fenilalanina del dipéptido **3** presenta una señal doble con $\delta_H=4.9$ ($\delta_C=54.5$), y el protón α de valina del dipéptido **4**, se observa como una señal doble con $\delta_H=4.5$ ($\delta_C=59.0$). Las señales de los grupos carbonilos, para el dipéptido **3** y **4**, son similares en sus desplazamientos químicos. El grupo éster del compuesto **3**, resuena a 173.0 ppm y el grupo amida a 165.6 ppm, mientras que en el dipéptido **4**, los grupos éster y amida se desplazan a 173.5 y 166.1 ppm, respectivamente.

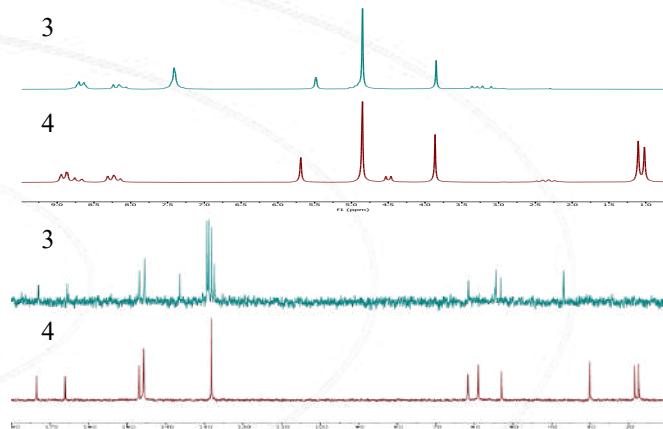


Figura 2. Espectros de ¹H y ¹³C del dipéptido catiónico **3** y **4**.

Conclusiones.

Se obtuvieron 2 dipéptidos catiónicos mediante la *N*-alquilación de una α -bromoamida en acetonitrilo con buenos rendimientos de reacción. La elucidación de los dipéptidos catiónicos se efectuó mediante RMN en 1D y 2D. La síntesis de compuestos análogos está siendo realizada para efectuar las evaluaciones biológicas.

Agradecimientos. ZCO agradece a SECIHTI por la beca de maestría CVU 2064859, así como también a los proyectos INFRA-2015-01-252013, 317105 e INFRA-2019301144.

Referencias.

1. D. L. V. Gutiérrez, J. C. Z. Gonzales, *Rev. Soc. Peruana Med. Interna.* 2016, **29**, 150-155.
2. Y. Zhang, C. Wang, W. Zhang, X. Li, *Biomater. Transl.* 2023, **4**, 5-17.

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN POR RMN DE COMPUESTOS DERIVADOS DE MORFOLINA CON POSIBLE ACTIVIDAD BIOLÓGICA

¹Andrea Sosa-Barrios, ²Rosmarbel-Morales Nava, ²Jorge Juárez-Posadas*

¹Maestría en Ciencias Químicas, Posgrado en Ciencias Químicas, BUAP.

²Laboratorio de Química Básica, Centro de Química ICUAP, BUAP.

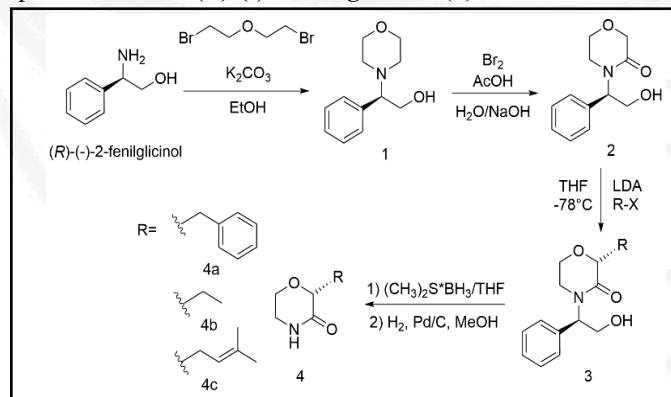
jorge.juarez@correo.buap.mx

Palabras clave: Síntesis, Heterociclos, RMN

Introducción. La síntesis de compuestos orgánicos es un campo de investigación fundamental, especialmente en el desarrollo de fármacos. Dentro de esta área, los compuestos heterocíclicos de nitrógeno, por ejemplo, los derivados de los anillos de morfolina, tienen una amplia relevancia debido a su actividad biológica y presencia en compuestos bioactivos. Tomando esto en cuenta, una de las herramientas más útiles para confirmar la estructura de estos compuestos y monitorear el progreso de las reacciones es la Resonancia Magnética Nuclear, ya que esta técnica proporciona información detallada sobre la conectividad, el entorno químico y la estereoquímica de las moléculas. Las técnicas de RMN de protón ¹H y ¹³C permiten caracterizar estos compuestos al analizar los desplazamientos químicos, las constantes de acoplamiento y las integrales de los espectros, sumadas al uso de experimentos de 2 dimensiones como COSY, HMBC, HSQC, entre otros, que ayudan a confirmar la conectividad entre átomos (1).

Objetivo. Presentar los resultados de la investigación sobre la síntesis y caracterización por RMN de compuestos heterocíclicos nitrogenados de tipo morfolina análogos a compuestos con actividad alcaloide.

Metodología. Para la obtención de los derivados de anillos de morfolina se aplicaron metodologías de síntesis química (Esquema 1), con condiciones específicas de reactivos y disolventes, haciendo uso de estrategias quirales para el control de la estereoselectividad, tal es el uso de inductores quirales como el (*R*)-(-)-2-fenilglicinol. (2)



Esquema 1. Ruta sintética para la obtención de compuestos de morfolina estereodiferenciados.

Resultados y discusión. La caracterización de los protones en las diferentes posiciones del anillo morfolínico del compuesto **4a**, ha sido posible por la identificación de sus desplazamientos químicos característicos y sus constantes de acoplamiento asociadas. En el espectro de RMN (Figura 1) se tienen las siguientes características: para los protones aromáticos se observan señales en las regiones de 7.20 ppm (3H) para las posiciones *meta* y *para*, y en 7.28 ppm (2H) para la posición *ortho*. Los protones alifáticos adyacentes a oxígeno H5, aparecen como multipletes en 3.87 ppm y en 3.59 ppm. El protón de H3 se observa en 3.66 ppm como un tdd por su acoplamiento con H2 y H7, los cuatro protones H2 y H6 son una señal múltiple a 2.83 ppm, los protones bencílicos (H7) se observan a 2.61 ppm, un desplazamiento a campo alto causado por el anillo aromático.

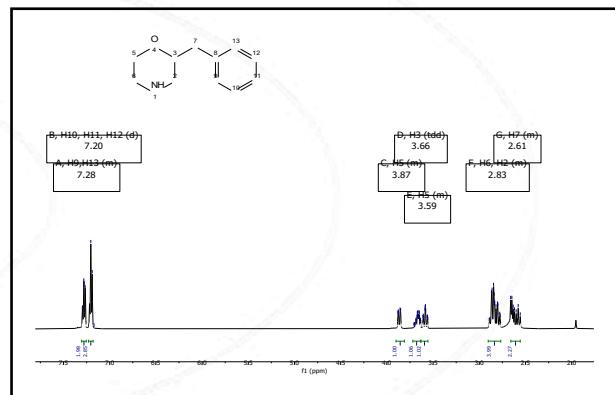


Figura 1. Espectro de ¹H de 2-benzilmorfolina.

Conclusiones. La caracterización del compuesto **4a** (2-benzilmorfolina) con el uso de RMN nos permite comprobar la viabilidad de la ruta sintética propuesta para la obtención de heterociclos nitrogenados de tipo morfolina.

Agradecimientos. Los autores agradecen al SECIHTI por el financiamiento para realizar el presente proyecto, ASB agradece por la beca de posgrado otorgada.

Referencias.

1. L.D. Field, S. Sternhell, J.R. Kalman, *Organic Structures from spectra*. Wiley, Chichester, England, 2013, pp 34-92.
2. S. Torres, M. Velasco, J.A. Gallegos-Rojas, S. Bernès, M.L. Orea, J.L. Terán, G. Huelgas, V. Gómez-Calvario, and J.R. Juárez. *J. Heterocyclic Chem.* 2019. **56**: 2677-2682.

ELUCIDACIÓN ESTRUCTURAL POR RMN DE UN NUEVO CICLOPÉPTIDO OBTENIDO DE LAS SEMILLAS DE *ANNONA DIVERSIFOLIA* SAFF.

Ulises Murrieta-Dionicio^{1*}, Benito Reyes-Trejo¹, Holber Zuleta-Prada¹, José Federico del Río Portilla²

¹Universidad Autónoma Chapingo. Texcoco Edo. de Méx., México. ²Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad Universitaria, Delegación Coyoacán, México.
Tel: 595 110 17 34. e-mail: murrieta.dionicio.091293@gmail.com

Tel: 595 110 17 34. e-mail: murrieta.dionicio.091293@gmail.com

Palabras clave: *Annona*, ciclopéptido RMN.

Introducción. Los ciclopéptidos del tipo orbítido son péptidos cílicos de origen vegetal, formados por la unión de entre 5 a 16 residuos de aminoácidos, sin la presencia de enlaces disulfuro (1). En el género *Annona* (familia Annonaceae), los estudios fitoquímicos recientes, dirigidos a la obtención de ciclopéptidos se han enfocado en el aprovechamiento de especies endémicas y nativas de México, como *A. globiflora* y *A. diversifolia* Saff. Las diferencias estructurales y en las secuencias de aminoácidos que conforman los anillos de los orbítidos han dado lugar a variaciones y/o similitudes en sus bioactividades (2-3). Por tanto, resulta relevante la búsqueda de nuevas estructuras ciclopeptídicas, con el fin de establecer bases para el desarrollo de fármacos derivados de productos naturales.

Objetivo. Este trabajo tuvo como objetivo la obtención de ciclopéptidos mediante técnicas cromatográficas y análisis por espectroscopía de RMN, con el fin de elucidar nuevas estructuras ciclopeptídicas del tipo orbitido.

Metodología. Material Vegetal: semillas de *A. diversifolia* Saff. Extractos: las semillas se trituraron y colocaron en maceración con disolventes de menor a mayor polaridad en el siguiente orden; hexano, MeOH y EtOH-H₂O (1:1, v/v). Aislamiento: El extracto hidroetanólico se llevó a extracciones líquido-líquido con hexano, CH₂Cl₂, AcOEt, BuOH y H₂O. La partición de BuOH se llevó a un sistema de purificación Isolera™ One Biotage®. Las fracciones obtenidas se llevaron posteriormente a un sistema de extracción en fase sólida. Las fracciones obtenidas se llevaron finalmente a un sistema HPLC. Análisis por RMN: Los espectros de RMN se procesaron y analizaron con el software MestReNova 15.0.1 (3).

Resultados y discusión. El compuesto **1** (Figura 1) presenta señales en la región de 6.7 a 9.0 ppm, correspondientes a seis grupos -NH de enlaces peptídicos. En la Figura 2 se observan ocho desplazamientos en la región entre 165 a 175 ppm atribuibles a grupos carbonilos. Por otra parte, la Figura 3 muestra las correlaciones entre protones -NH de los residuos de aminoácidos en la posición *i* y los carbonilos del residuo en la posición *i* + 1, lo que permitió establecer la secuencia de aminoácidos en el compuesto **1**.

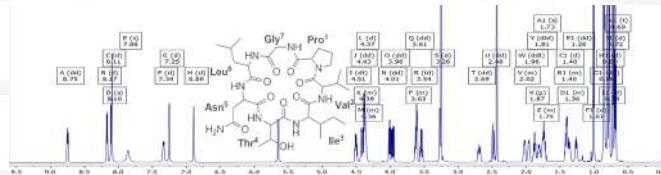


Figura 1. Espectro de RMN-¹H del compuesto (**1**) en DMSO-*d*₆ a 298 K, 700 MHz.

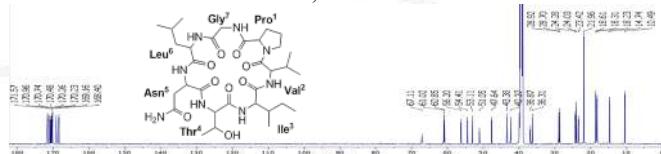


Figura 2. Espectro de RMN-¹³C del compuesto (1) en DMSO-*d*₆ a 298 K, 175 MHz.

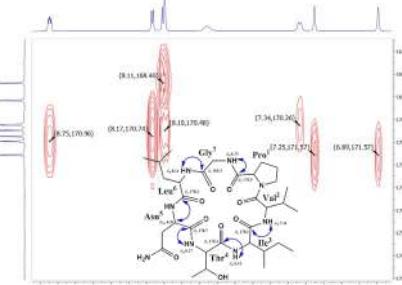


Figura 3. Expansión del espectro HMBC de 167 a 177 ppm en RMN^{13}C (E1) y de 6.9 a 8.8 ppm en RMN^1H (E2).

Conclusiones. Se logró aislar un nuevo heptapéptido del tipo orbítido a partir de la partición de AcOEt del extracto hidroetanólico. Su estructura fue elucidada mediante técnicas de RMN 1D y 2D.

Agradecimientos. A la SECIHTI por el apoyo otorgado con una beca No 790573 a UMD. Al LURMN del IO-UNAM.

Referencias

- Referencias

 1. J.R. Chekan, L.S. Mydy, M.A. Pasquale, R.D. Kersten, *Nat. Prod. Rep.* 2024, **41**, 1020-1059.
 2. J., Sosa-Rueda, V., Domínguez-Meléndez, A., Ortiz-Celiseo, F.C., López-Fentanes, C., Cuadrado, J.J., Fernández, A., Hernández-Daranas, F., Cen-Pacheco, *Phytochemistry*. 2022, **194**, 112839.
 3. U., Murrieta-Dionicio, F., Calzada, E., Barbosa, M., Valdés, B., Reyes-Trejo, H., Zuleta-Prada, D., Guerra-Ramírez, F., del Río-Portilla, *Molecules*. 2024, **29**, 5636.

EVALUACIÓN DE LA GENERACIÓN DE $^1\text{O}_2$ DE COLORANTES COSMÉTICOS MEDIANTE LA FOTO-OXIDACIÓN DE ERGOSTEROL

Karmen Manzano¹, Fernanda Vázquez-Ortega², Limni Ramírez¹, Roberto Hernández¹, Irene Lagunes², Ángel Trigos^{2*}, ¹Doctorado en Micología Aplicada, Universidad Veracruzana, Xalapa, México, ²Centro de Investigación en Micología Aplicada, Universidad Veracruzana, Xalapa, México. Correspondencia: calle médicos 5, Unidad del Bosque, 91010, Xalapa-Veracruz, Tel. +52 2288404255. E-mail: atrigos@uv.mx

Palabras clave: estrés oxidativo, fotosensibilizadores, oxígeno singulete.

Introducción. Los colorantes tienen importancia en la industria cosmética, por cuestiones económicas, culturales y sociales. Por otro lado, los colorantes tienen la capacidad de absorber energía en la región visible del espectro electromagnético, algunos de ellos son capaces de participar en reacciones fotoquímicas de tipo II en la generación de oxígeno singulete ($^1\text{O}_2$), (1-3), el cual está implicado en procesos biológicos como carcinogénesis, neurodegeneración, envejecimiento acelerado, etc. (4)

Objetivo. Evaluar la generación de $^1\text{O}_2$ de colorantes cosméticos mediante la foto-oxidación de ergosterol.

Metodología. Se evaluaron 25 colorantes de uso cosmético, mediante la metodología de foto-oxidación de ergosterol (5). Las reacciones se prepararon con 1 mM, 144 μM de colorante cosmético y 35 ml de etanol, las reacciones fueron irradiadas (4 CFL-T4-GE 20W, 380-780 nm) bajo flujo contante de oxígeno grado medicinal, durante dos horas; la reacción de foto-oxidación sin colorante fue establecida como el control negativo. Los productos de reacción fueron analizados mediante RMN ^1H (Bruker Advance 500 MHz) con CDCl_3 para la identificación e integraron las señales de los protones H-6 y H-7 de ergosterol (H-6: 5.57 ppm, ^1H , dd; H-7: 5.38 ppm, ^1H , dd) y peróxido de ergosterol (H-6: 6.25 ppm, ^1H , d; H-7: 6.50 ppm, ^1H , d).

Resultados y discusión. Se consideraron colorantes fotosensibilizadores aquellos que mostraron una mayor proporción de conversión de ergosterol a peróxido de ergosterol (E:PE) en comparación con el control negativo (Cuadro 1). Asimismo, ocho colorantes actuaron como fotosensibilizadores, a) – f) mostraron una conversión total de E:PE (100%), en cambio, los colorantes g) – i) demostraron conversión parcial de E:PE (Figura 1).

Cuadro 1. Proporción de conversión de E:PE de los colorantes fotosensibilizadores

Inciso	Colorante	E:PE	% (E:PE)
a)	Verde 8	0:1	0:100
b)	Clorofilina	0:1	0:100
c)	Rojo 22	0:1	0:100
d)	Rojo 27	0:1	0:100
e)	Rojo 28	0:1	0:100
f)	Rojo 3	0:1	0:100
g)	Amarillo 8	0.5:1	33:67
h)	Verde 5	5:1	83:17
i)	Verde 6	10:1	91:9
	Control	18:1	95:5

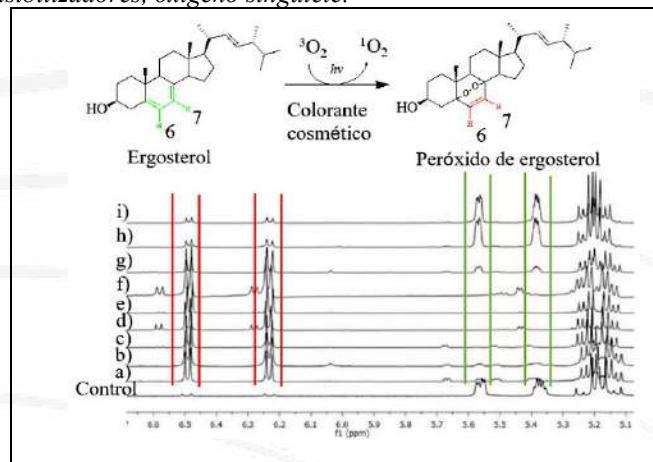


Figura 1. Compilación de espectros (RMN- ^1H) de las reacciones con colorantes fotosensibilizadores, en color verde señales de ergosterol y en rojo las de peróxido de ergosterol

De esta manera, mediante la foto-oxidación el ergosterol se demostró que seis colorantes utilizados en la formulación de productos cosméticos fueron capaces de actuar como compuestos pro-oxidantes al generar $^1\text{O}_2$, lo cual podría representar un posible riesgo a la salud, ya que, los cosméticos son productos de consumo frecuente sobre la piel, sin estricta regulación con base a procesos biológicos como absorción y/o bioacumulación de manera crónica.

Conclusiones. Mediante la foto-oxidación de ergosterol se demostró que ocho colorantes cosméticos fueron capaces de actuar como fotosensibilizadores y de generar $^1\text{O}_2$. Así, la exposición prolongada a productos de consumo que se aplican directamente en la piel con colorantes capaces de generar $^1\text{O}_2$ podrían significar un riesgo a la salud.

Agradecimientos. Este trabajo se financió con el proyecto CONAHCYT 181820. Becas doctorales CONAHCYT/SECIHTI (783795, 834829, 802758).

Referencias.

- 1 J. Yuan, R. Chen, X. Tang, Y. Tao, S. Xu, L. Jin, C. Chen, X. Zhou, C. Zheng y W. Huang, *Chem Sci*, 2019, **10**, 5031–5038.
- 2 I. Lagunes, F. Vázquez-Ortega y Á. Trigos, *J Food Sci*, 2017, **82**, 2051–2055.
- 3 F. Vázquez-Ortega, I. Lagunes y Á. Trigos, *Dyes and Pigments*, 2020, **176**, 108248.
- 4 K. Murotomi, A. Umeno, M. Shichiri, M. Tanito y Y. Yoshida, *Int J Mol Sci*, 2023, **24**, 2739–2739.
- 5 I. Lagunes y Á. Trigos, *J Photochem Photobiol B*, 2015, **145**, 30–34.

2-ACILACIÓN DEL 1H-PIRROL MEDIANTE UNA REACCIÓN DE FRIEDEL-CRAFTS Y SU CARACTERIZACIÓN MEDIANTE RMN DE ^1H Y ^{13}C .

Ángel Yahir Quiroz López, José Alvano Pérez Bautista, Omar Cortezano Arellano*

Instituto de Ciencias Básicas, Universidad Veracruzana, Luis Castelazo Ayala, Col. Industrial Anámas, CP 91190, Xalapa, Ver., México.
bvangelyahirquirozlopez2@gmail.com.

Palabras clave: *Pirrol, Acilación, Friedel-Crafts.*

Introducción. Los 2-acylpirroles son subunidades estructurales de gran relevancia debido a su presencia en productos naturales bioactivos como la calcimicina. (1) Debido a la relevancia de estos derivados pirrólicos decidimos preparar la 1-(1*H*-pirrol-2-il)butan-1-ona **2** a partir del 1*H*-pirrol **1** vía una acilación de Friedel-Crafts y también realizamos su caracterización a través de análisis de RMN de ^1H y ^{13}C . (2)

Objetivo. Sintetizar a la 1-(1*H*-pirrol-2-il)butan-1-ona **2** y caracterizarla mediante análisis de RMN de ^1H y ^{13}C .

Metodología. La preparación de la 1-(1*H*-pirrol-2-il)butan-1-ona **2** se realizó de acuerdo con el protocolo reportado por Weber *et al.* (2) Esta reacción de acilación se llevó a cabo empleando AlCl_3 como ácido de Lewis y cloruro de butirilo como agente acilante. El producto de reacción después de ser purificado por cromatografía de columna flash se analizó mediante análisis de RMN de ^1H y ^{13}C empleando un equipo de RMN Brucker de 500 y 125 MHz y CDCl_3 como medio de disolución.

Resultados y discusión. Para la 2-acilación del 1*H*-pirrol **1** se sometió a un tratamiento con AlCl_3 anhídrico y cloruro de butirilo a temperatura ambiente bajo atmósfera de nitrógeno. A pesar de que en la literatura se encuentra establecido el uso riguroso de un medio anhídrico para esta reacción, en nuestro trabajo empleamos diclorometano comercial que contenía trazas de agua sin utilizar línea de Schlenk obteniendo de esta manera como producto de acilación a **2** en un rendimiento del 87% (Figura 1). (2)

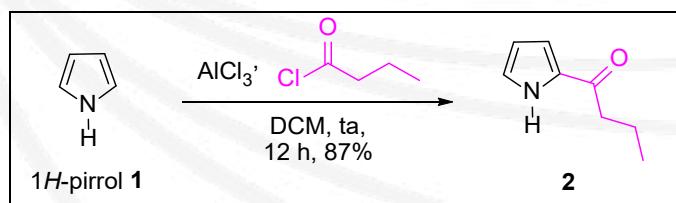


Figura 1. Reacción de 2-acilación del 1*H*-pirrol **1**.

La purificación la realizamos mediante recristalización en una mezcla de hexano/diclorometano con una proporción volumétrica de 3:1 y también mediante cromatografía flash empleando sílica gel de 300-400 mesh como adsorbente y hexano como eluyente obteniendo siempre los mismos rendimientos.

Después, de purificar a **2**, en su espectro de RMN de ^1H observamos que la señal singulete ancho correspondiente al $-\text{NH}$ de **2** aparece a $\delta = 9.65$ ppm en comparación con la señal del $-\text{NH}$ de **1** que aparece a $\delta = 8.0$ ppm en su correspondiente espectro de RMN de ^1H . Además, en el mismo espectro de RMN de ^1H de **2** también pudimos notar la aparición de dos señales triplete ($\delta = 2.75$ y $\delta = 0.99$ ppm) y una señal multiplete ($\delta = 1.76$) correspondientes al grupo $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CO}-$. Así mismo, en el espectro de RMN de ^{13}C de **2** pudimos observar la señal singulete ($\delta = 191.2$ ppm) correspondiente al carbono de carbonilo del grupo butanoil sustituyente en C2. De esta manera, los datos espectroscópicos del 2-acilpirrol **2** concuerdan con los reportados en la literatura (Figura 2). (3)

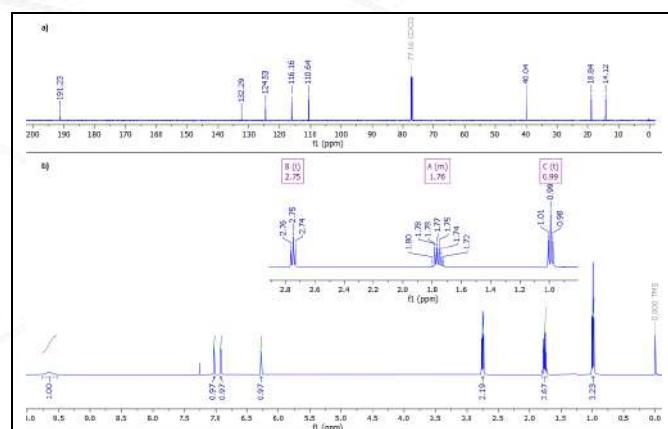


Figura 2. a) Espectro de RMN de ^{13}C y b) espectro de RMN ^1H del 2-acilpirrol **2**.

Conclusiones. Preparamos a la 1-(1*H*-pirrol-2-il)butan-1-ona **2** en un rendimiento moderado. Comprobamos la síntesis de **2** mediante su análisis de RMN de ^1H y ^{13}C .

Agradecimientos. Al Dr. Oscar García Barradas y la Q.C. Guadalupe Adriana Vásquez Reyes del IQA, UV por su apoyo con los análisis de RMN.

Referencias.

- J. S. Yadav, B. V. S. Reddy, G. Kondaji, R. Srinivasa Rao, S. Praveen Kumar, *Tetrahedron Lett.* 2002, **43**, 8133-8135.
- T. M. Weber, A. Leyens, L. Berning, B. Stork, J. Pietruszka, *Catal. Sci. Technol.* 2023, **13**, 6165.
- R. Matsuo, A. Miyashita, M. Kuwabara, S. Adachi, A. Matsuzawa, K. Sugita, *Synlett*, 2020, **31**, 1800-1804.

DETERMINACIÓN DE LA DINÁMICA DE HIDRÓLISIS Y MUTORROTACIÓN DE DISACÁRIDOS POR RMN

Marco Josué Ramos Paredes[¶], Apolo Velasco Ramírez[¶], José Manuel López Alcaraz[§], Isabel Iraí Aguilar de la Portilla[¶], Víctor Manuel González Díaz, Armando Ariza Castolo^{*}. Departamento de Química, Cinvestav-IPN, aariza@cinvestav.mx

Palabras clave: RMN-dinámica, disacáridos, cinética

Introducción. Los carbohidratos son biomoléculas fundamentales debido a su participación en múltiples procesos biológicos (1), para este trabajo se seleccionaron la maltosa y la lactosa que son disacáridos que presentan epimerización en la glucosa y son susceptibles a hidrólisis en medio ácido.

Objetivos.

Determinar la cinética de hidrólisis de la maltosa y lactosa así como la dinámica de epimerización de los disacáridos por RMN de ^1H . Comparar los resultados obtenidos por RMN ^1H con los determinados con RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ utilizando una secuencia simple o por transferencia de polarización.

Metodología. La hidrólisis se realizó utilizando DCl/D₂O y fueron determinadas por RMN de ^1H en un espectrómetro JEOL ECA-500 con un $B_0 = 10.7084$ T. La epimerización fue determinada en un espectrómetro Bruker Avance III HD con un $B_0 = 9.388$ T, en tubos de 5 mm O.D. utilizando D₂O como disolvente a temperaturas entre 25°C a 70°C (Fig. 1).

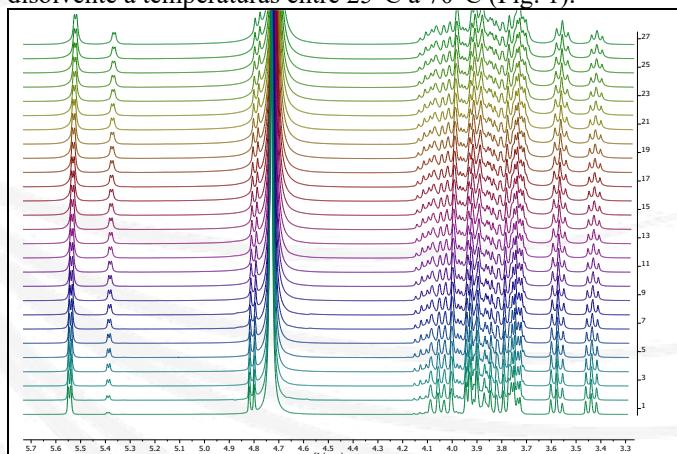


Figura 1. Determinación de espectros de RMN ^1H , cada 5' durante 150 minutos a 45°C.

Los espectros de RMN $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ se obtuvieron de acuerdo a la referencia (2) optimizando los experimentos para tener un tiempo total de adquisición <2' con señales cuantitativas.

Resultados y discusión. La hidrólisis de los disacáridos fue caracterizada durante 7 días, realizando las primeras determinaciones cada 30' durante 15h, posteriormente se obtuvieron espectros dos o tres veces al día, como se muestra en la figura 2.

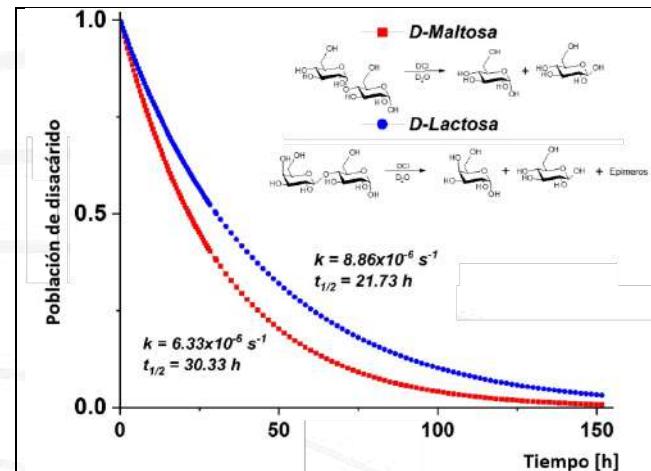


Figura 2. Cinéticas de hidrólisis de D-maltosa y D-lactosa.

La cinética de la mutorrotación es reversible y se realizó por RMN de ^1H integrando las señales de los hidrógenos anoméricos de los disacáridos y las que corresponde a la posición α al carbono anomérico. Se optimizaron los parámetros para lograr determinaciones cuantitativas de RMN de $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ en menos de 100" para poder determinar las cinéticas de mutorrotación en base a los pares de carbono.

Conclusiones. Se encontró que la hidrólisis de la maltosa en medio ácido se realiza más rápido que la de la lactosa. Se observó que la epimerización en medio ácido ocurre en menos de 5'. La mutorrotación de la maltosa en D₂O requiere de energías de activación de los isómeros $\alpha \rightarrow \beta$ y $\beta \rightarrow \alpha$ de 82.6 kJ/mol y 82.5 kJ/mol, respectivamente. Se encontró que las mejores condiciones para la determinación de espectros de RMN de $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ cuantitativos es utilizando la secuencia de pulsos DEPT.

Agradecimientos. MJRP, JMLA y IIAP reconocen el apoyo del Programa DELFÍN para realizar el verano de investigación en el Cinvestav.

Notas:

[¶] Igual contribución al desarrollo de la investigación.

^{*} CUCEI-UDG; [¶] UTM, [§] TecNM-Colima, [¶] CICATA Altamira.

Referencias.

- P. M. Dewick, *Medicinal Natural Products*, 3rd Ed. Wiley, Chichester, England, 2009, pp 485–491.
- M. Sanchez, S. Akoka, *Magn. Reson. Chem.* 2025, **63**, 545–559.

ANÁLISIS ESTRUCTURAL DEL PRODUCTO DE LA REACCIÓN INDOL-MANNICH MEDIANTE RMN BIDIMENSIONAL

Juan Carlos Ruiz Javier, Jacqueline Jiménez Hernández, Jorge R. Juárez Posadas*, Víctor Gómez Calvario, Instituto de Ciencias BUAP, Edificio IC8, Cd. Universitaria, 72592 Heroica Puebla de Zaragoza, Pue. 222 229 55 00 Ext. 7052, rj224470273@alm.buap.mx.

Palabras clave: *Indol, Mannich, COSY, HSQC*.

Introducción. Existe una variante poco conocida de la reacción de Mannich en la que el nucleófilo que ataca al ion iminio es el Indol. Esta reacción implica la condensación del Indol con formaldehído y una amina secundaria, lo que conduce a la formación de un 3-aminometilindol (1). Aunque su aplicación actual es limitada, es una reacción muy útil para sintetizar indoles sustituidos y un punto de partida para la obtención de β -carbolinas, compuestos presentes en numerosos productos naturales con interesantes actividades biológicas (2).

Los productos que se obtienen por medio de esta reacción presentan múltiples señales aromáticas de RMN de ^1H y ^{13}C . La única manera de asignar correctamente dichas señales, así como las correspondientes al grupo aminometilo, es mediante técnicas en bidimensionales de RMN, como los experimentos COSY y HSQC.

Objetivo. Caracterizar, mediante espectroscopía de RMN unidimensional y bidimensional, cada una de las señales correspondientes al producto obtenido en la reacción “Indol-Mannich”.

Metodología. El procedimiento se basó en el trabajo de Snyder y colaboradores (3). La estrategia es sencilla, una reacción que en un lapso de 2 días puede obtenerse. Primero se forma la mezcla de Mannich con ácido acético glacial como medio ácido, formaldehído (CH_2O) y dietilamina ($\text{HN}(\text{CH}_2\text{CH}_3)_2$), ésta se agrega directamente al Indol. La mezcla se mantuvo bajo agitación por 20 horas aproximadamente, después se agrega NaOH y se vuelve a esperar 2 horas más para después realizar la extracción y purificación. El producto obtenido se separa mediante una columna cromatográfica en sílice, utilizando un sistema acetato/metanol. El producto purificado se analizó por RMN en disolvente CDCl_3 , empleando un espectrómetro Bruker de 500 MHz.

Resultados y discusión. Para optimizar la reacción se evaluaron diferentes condiciones experimentales, variando tanto los equivalentes molares de los reactivos como parámetros como la temperatura y la concentración de NaOH. El espectro del producto obtenido se muestra en la Figura 1. La influencia de la temperatura y la concentración de base en el porcentaje de conversión se presenta en el Cuadro 1. La conversión de los productos se determinó a partir de los espectros de RMN de ^1H .

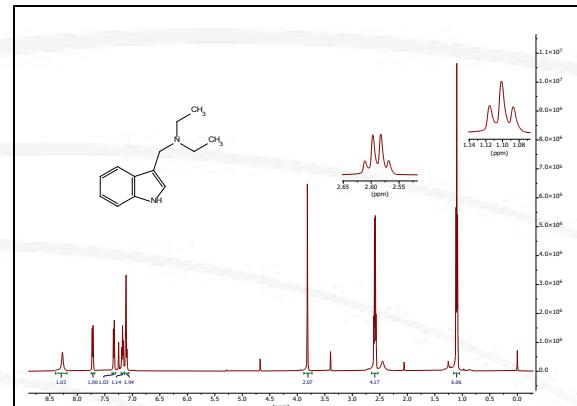


Figura 1. Espectro de ^1H del producto Indol-Mannich.

Cuadro 1. Condiciones variables de la reacción (Temperatura y concentración del NaOH) y sus respectivos porcentajes de conversión obtenidos.

Variable	% Conversión
En calentamiento	0
Temperatura ambiente	27.7
En baño de hielo	21.74
3 M	15.75
4 M	24.4
5 M	22.7

Conclusiones. La reacción tipo “Indol-Mannich” permitió obtener 3-aminometilindol con rendimientos y conversiones variables según las condiciones empleadas. La espectroscopía de RMN, tanto 1D como 2D, resultó esencial para la caracterización estructural completa del producto, especialmente debido a la complejidad de las señales aromáticas.

Agradecimientos. Gracias a mis directores de tesis y al SECIHTI por otorgarme la beca con número “2052154” para financiar el presente proyecto.

Referencias.

- 1.C. Lindquist, O. Ersoy and P. Somfai, *Tetrahedron*, 2006, **62**, 3439–3445.
- 2.L.-H. Xie, J. Cheng, Z.-W. Luo and G. Lu, *Tetrahedron Lett.*, 2018, **59**, 457–461.
- 3.H. R. Snyder, C. W. Smith and J. M. Stewart, *JACS*, 1944, **66**, 200–204.

ESTUDIO DE COMPLEJOS DE TRIFENILESTAÑO (IV) DERIVADOS DE CARBOXILATOS DE ISATINA E INDIRUBINA.

Jose Luis Maya-García,^a Marcela López-Cardoso,^{a*} Gabriela Vargas-Pineda,^a Perla Román-Bravo,^a Raymundo Cea-Olivares.^{b*}

a) Centro de Investigaciones Químicas, IICBA, Universidad Autónoma del Estado de Morelos. Av. Universidad 1001, C.P. 62209 Cuernavaca, Morelos, México; b) Instituto de Química, Universidad Autónoma de México, Circuito Exterior, Ciudad Universitaria, 10810, Ciudad de México, México.

E-mail: jlm990201@gmail.com

Palabras clave: Isatina, indirubina, complejos de Sn(IV)

Introducción. La isatina e indirubina son compuestos activos biológicamente que se encuentran en la naturaleza. (1) La introducción de grupos carboxilatos a estas matrices moleculares permite la formación de complejos de trifenilestaño (IV), lo cual se ha reportado que potencia su actividad biológica. (2) La resonancia magnética nuclear (RMN) nos puede ayudar a conocer el número y modo de coordinación de dichos complejos, especialmente RMN de ¹¹⁹Sn nos da información valiosa sobre el ambiente coordinante del Sn. (3)

Objetivo. Sintetizar y caracterizar por IR, EM, RMN de ¹H, ¹³C y ¹¹⁹Sn, 5 carboxilatos de trifenilestaño (IV) derivados de isatina e indirubina *N*-sustituidos con un fragmento de ácido acético.

Metodología.

La síntesis de los complejos se realizó a partir de los ligantes correspondientes en forma de ácidos carboxílicos. La reacción se llevó a cabo con cantidades equimolares del ligante con NaOH y Ph₃SnCl en metanol a reflujo por 4 horas. Los espectros se adquirieron en CDCl₃, DMSO-d₆ y MeOD en un espectrómetro Bruker Avance III HD 500 MHz.

Resultados y discusión.

Se obtuvieron cinco complejos con rendimientos superiores al 70% (Figura 1).

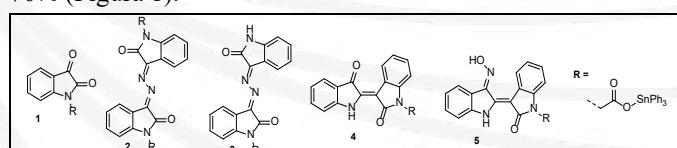


Figura 1. Estructura de los complejos sintetizados.

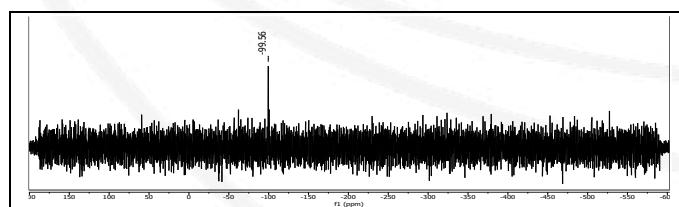


Figura 2. ¹¹⁹Sn-RMN del complejo 1 en CDCl₃. δ(ppm).

En todos los complejos el comportamiento en RMN fue muy similar. En los espectros de ¹H se observan 2 señales prominentes, 7.5 y 7.2 ppm aproximadamente, correspondientes a los hidrógenos *ortho*, *meta* y *para* del fragmento SnPh₃ (cuadro 1). En el espectro de ¹³C se observan 4 señales del fragmento SnPh₃ correspondientes al carbono *ipso* en 143 ppm, los carbonos *ortho*, *meta* y *para* en 136, 128 y 129 ppm respectivamente (cuadro 1).

Cuadro 1. Desplazamientos de ¹H y ¹³C δ(ppm) de los complejos.

	H- orto	H- orto y para	C- ipso	C- orto	C- meta	C- para
1	7.70	7.39	142.9	136.5	128.7	129.4
2	7.54	7.19	143.1	136.7	128.9	129.6
3	7.54	7.20	143.1	136.7	128.9	129.6
4	7.51	7.20	143.2	136.8	128.8	129.5
5	7.53	7.19	143.3	138.8	128.8	129.5

Los espectros de ¹¹⁹Sn mostraron un desplazamiento de -264 ppm en DMSO-d₆ y -232 ppm en MeOD. Este valor corresponde a una pentacoordinación del estaño en donde se sugiere una coordinación monodentada del carboxilato y al ser disolventes coordinantes, se propone su interacción en la esfera de coordinación. (3) En CDCl₃, un disolvente no coordinante, el desplazamiento es de -99 ppm (Figura 2) indicando una tetracoordinación con modo de coordinación monodentado. (3)

Conclusiones. Se obtuvieron cinco complejos de trifenilestaño (IV). Su estudio por RMN muestra una pentacoordinación en disolventes coordinantes (DMSO-d₆, MeOD) y tetracoordinación en no coordinantes (CDCl₃).

Agradecimientos. A SECIHTI por el apoyo de ayudante de investigador SNI III (1323433) y al LANEM (CIQ-UAEM).

Referencias.

1. M. Fogaça, P. Cândido, L. Benicio, *Pharm Biol.*, 2017, **55**, 2005-2014.
2. Y. Qiu, R. Zhang, *New. J. Chem.*, 2017, **41**, 5639-5650.
3. S. Rehman, S. Ali, A. Badshah, *Synth. React. Inorg. Met.-Org. Chem.*, 2004, **34**, 1379-1399.

CARACTERIZACIÓN DE COMPUESTOS HETERODITÓPICOS CON CIPROFLOXACINO Y TETRAZOL CON DI-ORGANOESTAÑO (IV)

Brenda Joseline Alonso-Uribe,^a Marco Antonio Pérez-Salgado,^a Marcela López-Cardoso,^{a*}
Gabriela Vargas-Pineda,^a Perla Román-Bravo,^a Raymundo Cea-Olivares.^{b*}

a) Centro de Investigaciones Químicas, IICBA, Universidad Autónoma del Estado de Morelos. Av. Universidad 1001, C.P. 62209 Cuernavaca, Morelos, México; b) Instituto de Química, Universidad Autónoma de México, Circuito Exterior, Ciudad Universitaria, 10810, Ciudad de México, México.

E-mail: marce@uaem.mx

Palabras clave: Ciprofloxacino, ditiocarbamato, diorganoestaño(IV).

Introducción.

El ciprofloxacino es un compuesto que forma parte de las fluoroquinolonas y tiene una extensa actividad antimicrobiana frente a bacterias Gram-positivas y negativas. Su estructura se compone de dos anillos bicíclicos fusionados, en el nitrógeno de estos anillos se enlaza un sustiyente ciclopropilo, seguido por un ácido carboxílico en la posición 3, un carbonilo en la posición 4, un flúor en la posición 6 y un grupo piperazínico en la posición 7 (Figura 1). (1)

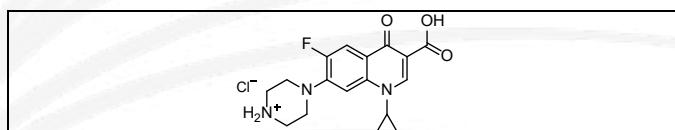


Figura 1. Estructura del Ciprofloxacino.

Se ha reportado que la combinación de metales con compuestos farmacológicos potencia la efectividad de los fármacos, (2) por lo cual, en esta investigación se sintetizaron los primeros compuestos heteroditópicos derivados de ciprofloxacino que contienen tetrazoles coordinados a organometálicos de estaño (IV).

Objetivo.

Sintetizar y caracterizar por IR, EM, RMN de ¹H, ¹³C y ¹¹⁹Sn 6 complejos heteroditópicos de diorganoestaño (IV) derivados del ditiocarbamato de ciprofloxacino con 1-metil-1H-tetrazol-5-tiol y 1-fenil-1H-tetrazol-5-tiol.

Metodología.

La síntesis se realizó mediante la reacción de ditiocarbamatos de clorodiorganoestaño (IV) con los tiolatos de potasio derivados de 1-metil-1H-tetrazol-5-tiol y 1-fenil-1H-tetrazol-5-tiol. Los espectros se adquirieron en CDCl₃ usando un espectrómetro Bruker Avance III HD 500 MHz.

Resultados y discusión.

En el cuadro 1 se presentan los datos comparativos de RMN de los compuestos **1-6**, donde se aprecia que los desplazamientos químicos de ¹³C de la parte del ditiocarbamato se encuentran entre 196-199 ppm. Los desplazamientos de ¹¹⁹Sn presentados en el cuadro 1 están dentro del rango reportado en la literatura para una hexacoordinación (-210 a -400 ppm). (3) Las estructuras

propuestas para estos complejos se presentan en la figura 2, donde se propone la unión anisobidentada del ditiocarbamato con el estaño (IV), mientras que el tetrazol se enlaza al estaño (IV) a través del azufre y a su vez, establece una interacción con un nitrógeno adyacente al tiol. Los desplazamientos de los carbonos C-9 (COOH) y C-4 (C=O) no varían debido a que el átomo de estaño no se coordina hacia ese sitio. El desplazamiento del carbono (C-5') en los ligantes de tetrazol se encuentra en 163 ppm, mientras que su desplazamiento se modifica hacia 157-160 ppm cuando se coordina con el estaño, indicando una deslocalización electrónica (cuadro 1).

Cuadro 1. Algunos desplazamientos importantes de RMN (¹³C y ¹¹⁹Sn) de los complejos **1-6**. L = Ligante. δ(ppm)

Señal	L	1	2	3	4	5	6
C-14	214	197	198	199	196	198	198
C-9	166	166	166	166	166	166	166
C-4	176	177	177	176	176	176	176
C-5'	163	158	158	159	157	160	158
¹¹⁹ Sn	-	-322	-213	-216	-320	-213	-215

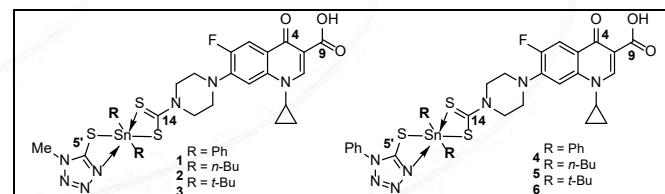


Figura 2. Estructura de los complejos sintetizados **1-6**.

Conclusiones.

Se obtuvieron seis compuestos ditópicos organometálicos de Sn (IV). Su estudio por RMN indica la obtención inequívoca de los mismos y la RMN de ¹¹⁹Sn muestra una hexacoordinación del estaño (IV) en solución.

Agradecimientos.

Al LANEM (CIQ-UAEM).

Referencias.

1. H. Koga, A.Itoh, S.Murayama, S.Suzue, T.Irikura, *Med. Chem.*, 1980, **23**, 1358- 1363.
2. B. Lippert, *Coord. Chem. Rev.* 2000, **200**, 487-516.
3. S. Xue, H. Yin, Q. Wang, D. Wang, *Heterat. Chem.*, 2005, **16**, 271-277.

SÍNTESIS, CARACTERIZACIÓN Y ESTUDIO DE RECONOCIMIENTO DE DOS IMIDAS DERIVADAS DEL ANHÍDRIDO 1,8-NAFTÁLICO

Hilda Barquín-Ledesma,¹ Cielo Domínguez-Leal,¹ Karina-Mondragón-Vásquez,² Jorge Guillermo Domínguez-Chávez,² Ma. Remedios Mendoza-López,¹ Oscar García-Barradas^{1*}

¹Instituto de Química Aplicada, ²Facultad de Bioanálisis-Veracruz, Universidad Veracruzana, Luis Castelazo Ayala s/n, Col. Industrial ánimas, 91190, Xalapa, Veracruz, 2288428916, osgarcia@uv.mx

Palabras clave: fluorescencia, naftalimidas, iones metálicos.

Introducción. La detección selectiva de iones metálicos, tanto en el ambiente como en sistemas biológicos, es un desafío relevante para la ciencia actual. En este contexto, las sondas fluorescentes, llamadas así por la presencia de fluoróforos en su estructura, se destacan como herramientas de señalización altamente sensibles y selectivas para el reconocimiento de dichos analitos.(1) Los derivados de naftaleno, como el anhídrido 1,8-naftálico y las naftalimidas, son fluoróforos ampliamente utilizados en el desarrollo de sondas fluorescentes; su unión a alquilaminas propicia la posibilidad de interaccionar con iones metálicos.(2)

Objetivo. Sintetizar, caracterizar y evaluar la afinidad de dos naftalimidas derivadas de la etilendiamina y de la dietilentriamina frente a diversos iones metálicos.

Metodología. La síntesis de la imidas derivadas de etilendiamina (N1) y dietilentriamina (N2) se adaptaron de lo reportado en la literatura.(3, 4) Los productos se caracterizaron mediante resonancia magnética nuclear (RMN). Se evaluaron sus propiedades de fluorescencia mediante espectroscopía UV-Visible y de emisión de fluorescencia, y se evaluó su afinidad frente a Zn^{2+} , Na^+ , K^+ y Cu^+ a través de una prueba de complejos supramoleculares.

Resultados y discusión. En la Figura 1 se presenta el espectro de RMN de 1H de N1. Entre 4.14 y 4.22 ppm se observa un sistema AA'BB' que corresponde a los metilenos del anillo de dihidroimidazol. N1 no mostró afinidad a los iones utilizados.

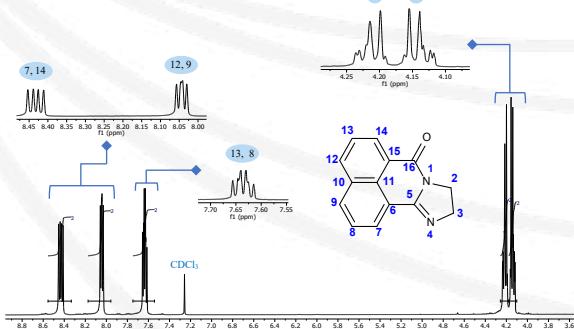


Figura 1. Espectro de RMN 1H (500 MHz, $CDCl_3$, 50 °C) de N1.

En la Figura 2 se observa el espectro de RMN de 1H de N2.

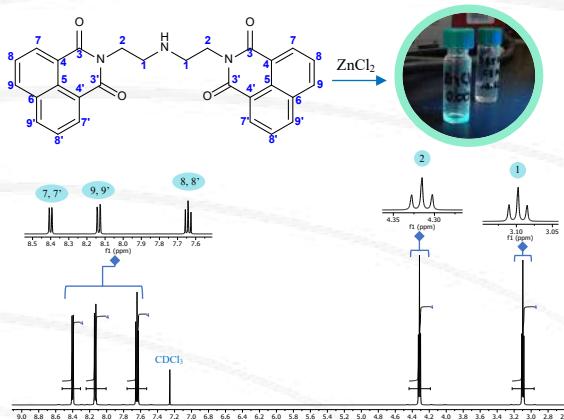


Figura 2. Espectro de RMN 1H (500 MHz, $CDCl_3$, 40 °C) de N2. En la fotografía se observa el producto en presencia de $ZnCl_2$, cuya fluorescencia bajo luz UV de onda larga es verde.

N2 mostró un cambio notable en la intensidad de fluorescencia en presencia de $ZnCl_2$: N2 se “enciende” debido a la inhibición del proceso PET intramolecular. En presencia de $(CH_3COO)_2Zn$ no se observó este fenómeno, lo que sugiere que el contraria determina el proceso de asociación.

Conclusiones. Se sintetizaron dos naftalimidas, una derivada de etilendiamina (N1) y, la segunda, derivada de dietilentriamina (N2), con rendimientos del 49 y 48%, respectivamente, las cuales fueron caracterizadas mediante RMN. N1 no mostró selectividad frente a los iones utilizados; por el contrario, N2 exhibió un cambio en la intensidad de fluorescencia en presencia de $ZnCl_2$ debido a la inhibición del proceso PET que reestablece la fluorescencia en el sistema.

Agradecimientos. A la SECIHTI por el otorgamiento de la beca 4036374; a la Q.C. Guadalupe Adriana Vásquez, por la obtención de los espectros de RMN.

Referencias.

1. L. Li, J. Wang, S. Xu, C. Li, B. Dong, *Front. Chem.* 2022, **10**, 1-15.
2. N. Jain, N. Kaur, *Coord. Chem. Rev.* 2022, **459**, 214454.
3. D. L. Reger, J. J. Horger, A. Debreczeni, M. D. Smith, *Inorg. Chem.* 2011, **50**, 10225-10240.
4. I. Grabchev, C. Petkov, V. Bojinov, *Dyes Pigm.* 2001, **48**, 239-244.

OBTENCIÓN DE NUEVOS DERIVADOS AMÍDICOS DEL 2-(1H-BENCIMIDAZOL-2-IL)ANILINA

**Campos Ojeda Alberto^a, Sánchez Meza Alfonso Fabián^b, Jesús Alberto Barrón Zambrano^a,
Gumersindo Mirón López^b, Jimmy Josué Ceballos Cruz^a, Rubén Marrero Carballo^{b*}, Adriana
Esparza Ruiz^{a*}**

^aFacultad de Ingeniería Química, UADY, Periférico Norte Km 33.5. Tablaje Catastral 13615.
Chuburná de Hidalgo Inn. Mérida, Yucatán, C.P. 97302.

^bFacultad de Química, UADY, Paseo de las Fuentes, Inalámbrica. Mérida, Yucatán, C.P. 97069.
a20223005@alumno.uday.mx, a21223042@alumnos.uday.mx, ruben.marrero@correo.uday.mx,
adriana.esparza@correo.uday.mx

Palabras clave: bencimidazol, amidas, sulfonamidas

Introducción. Los bencimidazoles constituyen una clase de compuestos heterocíclicos que han adquirido creciente relevancia debido a su amplio espectro de actividades biológicas. El interés en esta familia de compuestos ha originado numerosos estudios acerca de su síntesis (1). La obtención de derivados amídicos como benzamidas y bencenosulfonamidas se pueden llevar a cabo mediante la adición de 4-dimetilaminopiridina (DMAP) que, en conjunto con trietilamina (Et_3N), se vuelve un excelente catalizador para ambas reacciones (2).

Objetivo. Determinar mediante experimentos de RMN la estructura de nuevos derivados sintetizados a partir de 2-(1H-bencimidazol-2-il)anilina.

Metodología. Los compuestos se obtuvieron por condensación del **1** con el *p*-TsCl o anhídrido benzoico por un método previamente reportado, usando DMAP y Et_3N (3). Se monitoreó por TLC. Se realizó una extracción líquido-líquido y se purificó por cromatografía en columna. Las estructuras de los compuestos se elucidaron por RMN de ^1H y ^{13}C , y experimentos en 2D (COSY, HSQC y HMBC).

Resultados y discusión. La *N*-(2-(1H-bencimidazol-2-il)fenil)-4-metilbencenosulfonamida (**2**) fue obtenida por medio de una reacción nucleofílica entre el 2-(1H-bencimidazol-2-il)anilina y *p*-TsCl. A comparación del ligante **1**, el cual es un sólido que funde a 211 °C, el compuesto **2** se obtuvo como un aceite de color ámbar (rend. 70 %). Los datos obtenidos de los experimentos de RMN, en 1D y 2D, como ejemplo se presenta el de HMBC (Figura 1), ayudaron a asignar los desplazamientos de ^1H y ^{13}C . El compuesto *N*-(2-1H-bencimidazol-2-il)fenil]benzamida (**3**) se obtuvo mediante la catálisis de DMAP/ Et_3N , usado para la formación de amidas a partir de aminas deficientes en electrones, se obtuvo como un sólido blanco, que funde a ~233 °C. Su espectro de RMN- ^1H , mostró señales en la región aromática [7.10 a 7.85 ppm] y la señal del grupo amida a 13.69 ppm, mientras que la señal del NH del centro imidazólico fue visible a 9.76 ppm, la formación de la amida también se confirmó en RMN- ^{13}C , que, comparando con su

molécula precursora, aparece una nueva señal del N-C=O a 166.4 ppm. La asignación de las demás señales se apoyó con experimentos en 2D, como el HMBC, ver Figura 2.

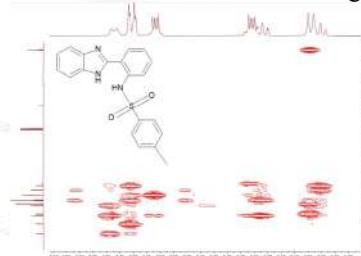


Figura 1. Espectro HMBC del derivado 2.

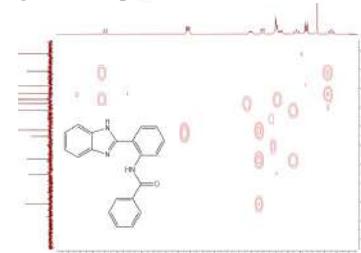


Figura 2. Espectro HMBC del derivado 3.

Conclusiones. Se obtuvo una sulfonamida y una benzamida derivadas de 2-(1H-bencimidazol-2-il)anilina mediante catálisis por DMAP. Con la ayuda de los experimentos de RMN en 1D y 2D (COSY, HSQC y HMBC), se elucidó la estructura de los compuestos obtenidos y se realizó la asignación inequívoca de ^1H y ^{13}C .

Agradecimientos. A la Facultad de Ingeniería Química y a la Facultad de Química por la infraestructura.

Referencias

1. M. S. Vasava, M. N. Bhoi, S. K. Rathwa, D. J. Jethava, P. T. Acharya, D. B. Patel and H. D. Patel, *Mini Rev Med Chem*, 2020, **20**, 532–565.
2. A. K. Ghosh and D. Shahabi, *Tetrahedron Lett*, 2021, **63**, 152719.
3. R. M. Carballo, H. A. Peniche-Pavía, R. Quijano-Quiñones, D. Cáceres-Castillo, G. Mirón-López, M. Graniel-Sabido, A. Reyes-Cuapio, R. E. Moo-Puc, L. Valencia-Chan and G. J. Mena-Rejón, *J Mex Chem Soc*, 2024, **68**, 124–134.

LIPASAS EN SEMILLAS DE *RICINUS COMMUNIS*: POTENCIAL BIOCATALÍTICO PARA LA TRANSESTERIFICACIÓN DE ÁCIDOS GRASOS PARA PRODUCIR BIODIESEL

Rodolfo Méndez Bellido,¹ Héctor Luna Contla,² Ernesto Sánchez Mendoza,² Tomás Guerrero Briseño,¹ Arturo Coaviche Yoval,³ Ricardo Tovar Miranda^{1*} Instituto de Ciencias Básicas, Universidad Veracruzana. Av. Dr. Luis Castelazo Ayala s/n, Col. Industrial Animas CP 91190, Xalapa-Enríquez, Ver. México. Tel. 2288421700. Ext. 13930. rtovar@uv.mx.

Palabras clave: biodiesel, enzima, transesterificación.

Introducción. La gran abundancia de *R. communis*, puesto que crece en una amplia variedad de climas, hacen que las enzimas presentes en el endosperma de las semillas puedan ser buenos candidatos para ser utilizados como biocatalizadores en reacciones de hidrólisis, esterificación y transesterificación (1). Estas lipasas soportadas en su matriz natural, sin necesidad de un tratamiento complicado, pueden ser usadas como catalizador en la conversión de aceites o grasas a biodiesel (2-3), a través de un proceso ecológico con que apoyaría en la biodegradación de estos triglicéridos. El presente trabajo describe los resultados obtenidos en la transesterificación de un aceite vegetal utilizando diferente carga enzimática y etanol para la obtención de biodiesel. Los resultados de esta biotransformación fueron valorados por medio de RMN-¹H.

Objetivo. Evaluar la capacidad, mediante RMN de ¹H, del concentrado enzimático (CE) de las semillas de *R. communis* para transesterificar aceite vegetal utilizando etanol.

Metodología. En un matraz redondo de 5 mL, se colocaron 100 mg de aceite vegetal como sustrato, etanol (3, 6 y 9 eq.), CE del endospermo de *R. communis* (20, 50, 100%) en 1 mL de isooctano, se agitaron a 320 rpm a 37°C por 24 h, posteriormente las reacciones fueron filtradas, el disolvente evaporado y los crudos de reacción analizados por RMN.

Resultados y discusión. Los resultados se muestran en la Tabla. El porcentaje de conversión se estableció mediante RMN-¹H, basándose en la integral de las señales entre 4.35 y 4.05 ppm, correspondientes a los protones CH₂-20 y CH₂-22 del triglicérido y los protones CH₂-20 del producto de transesterificación. Se evaluaron varios parámetros de la biotransformación, incluyendo la proporción de CE, disolvente y tiempo de reacción. Dado que solo 3 y 6 equivalentes de etanol resultaron suficientes para llevar a cabo la reacción en ensayos previos, se adoptó la misma cantidad como punto de partida. Se observó que con el 50 y 100 % de CE se obtuvieron los mayores rendimientos.

Tabla. Reacciones de transesterificación de triglicéridos

entrada	CE (%)	Etanol (eq)	Conversión (%)
A	20	3	32
B	50	3	57
C	100	3	96

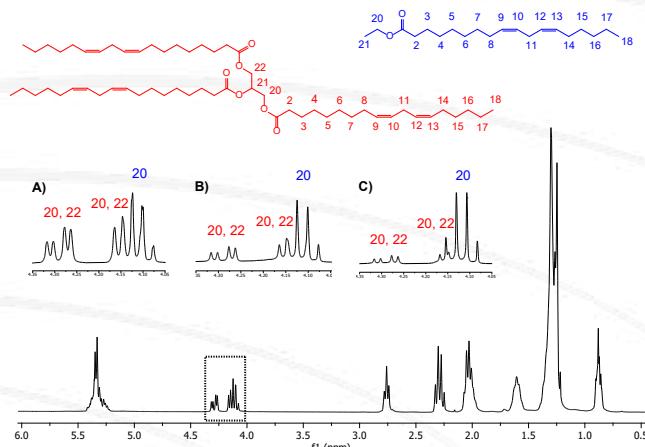


Figura. Espectros de RMN-¹H de las reacciones de transesterificación (CDCl₃, a 300 MHz) correspondiente a los experimentos de la Tabla:

Conclusiones. De la Tabla se observa que se necesita la misma cantidad de enzima y aceite para llevar la conversión a cerca de 100%, cuando se utiliza la mínima cantidad de etanol en la transesterificación y así preparar biodiesel de forma ecológica. Además, también es posible concluir que las lipasas presentes en las semillas de *R. communis* pueden ser utilizadas como biocatalizador en las reacciones de esterificación y transesterificación de ácidos grasos. La RMN-¹H resultó ser el método analítico confiable para cuantificar los rendimientos de cada experimento.

Agradecimientos. QC Guadalupe Vásquez Reyes del IQA-UV; Dr. José Luis Olivares Romero del INECOL así como al Prof. Marco Antonio Vera Ramírez, UAM-I, por los espectros de RMN.

Referencias.

1. F. Tavares, J. Petry, P.R. Sackser, C.E. Borba, E.A. Silva, *Ind. Crop. Prod.* 2018, **124**, 254-264.
2. Tütter, M. *J. Am. Oil Chem. Soc.*, 1998, **75**, 417-420.
3. A. González Rivas, V. Ávila Vazquez, M.M. Aguilera Flores, G.V. Cerrillo-Rojas & H. C. Correa-Aguado *Appl. Biochem. Biotechnol.* 2023, **195**, 1297-1318.

SÍNTESIS ENANTIOSELECTIVA DE (*R*)-4-(2-HIDROXI-1-FENILETIL)MORFOLIN-3-ONA

Eduardo Domínguez Montalvo, Jacqueline Jiménez Hernández, Víctor Gómez Calvario, Jorge R. Juárez Posadas*. Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Av. San Claudio s/n, Cd Universitaria, San Manuel, 72592 Heroica Puebla de Zaragoza, Pue, 2212070615, dm224470271@alm.buap.mx

Palabras clave: Morfolinona, morfolina, espectroscopia.

Introducción. La morfolin-3-ona, es un heterociclo de gran relevancia en química medicinal, valorado por su versatilidad como base estructural en el desarrollo de fármacos y por su potencial en aplicaciones biológicas.(1) Su esqueleto ha sido ampliamente estudiado como plataforma para la introducción de sustituyentes estratégicos, la realización de alquilaciones y la facilitación de reacciones estereoselectivas, así como en el diseño de procesos asimétricos orientados a la obtención de compuestos bioactivos.(2) La estructura de la 2-morfolina está presente en compuestos como la (*S,S*)-reboxetina, (*S,R*)-reboxetina, viloxazina, y edivoxetina, los cuales son inhibidores de la recaptación de noradrenalina.(3)

Objetivo. Sintetizar el compuesto (*R*)-4-(2-hidroxi-1-feniletil)morfolin-3-ona y confirmar su estructura mediante técnicas de resonancia magnética nuclear (RMN).

Metodología. A una solución de (*R*)-morfolin-2-feniletan-2-ol en ácido acético se trató con una disolución de bromo en el mismo disolvente. Posteriormente, se incorporó agua y se continuó la agitación. La mezcla se neutralizó con hidróxido de sodio y se lavó con solución salina saturada (figura 1). El producto orgánico se extrajo con diclorometano, se secó sobre sulfato de sodio anhídrido y se concentró a presión reducida. Finalmente, el material crudo se purificó mediante cromatografía en columna sobre gel de sílice y se caracterizó por espectroscopía de RMN.

Resultados y discusión. La estructura del compuesto sintetizado se confirmó mediante espectroscopía de resonancia magnética nuclear de ¹H y ¹³C. Las señales observadas coincidieron con las reportadas en espectros de referencia, confirmando la identidad del producto. Destaca la señal característica del carbono carbonílico en 168 ppm en el espectro de ¹³C (figura 2). La integración y multiplicidad de las señales en ¹H resultaron consistentes con la estructura propuesta, corroborando la correcta asignación de cada ambiente químico.

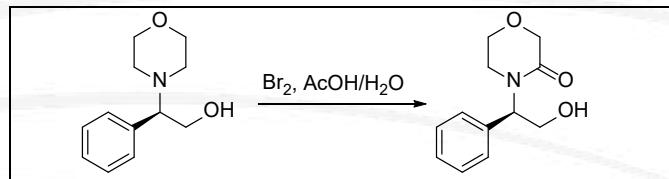


Figura 1. Esquema de reacción.

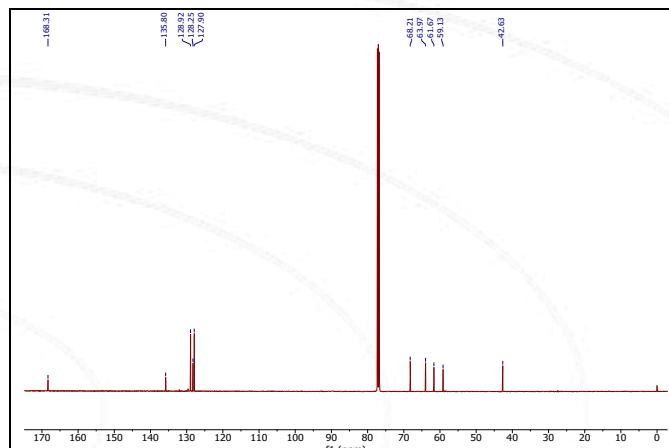


Figura 2. Espectro de ¹³C del producto (*R*)-4-(2-hidroxi-1-feniletil)morfolin-3-ona.

Conclusiones. Se logró la síntesis del compuesto (*R*)-4-(2-hidroxi-1-feniletil)morfolin-3-ona, su estructura molecular fue confirmada satisfactoriamente mediante análisis espectroscópicos de resonancia magnética nuclear de ¹H y ¹³C

Agradecimientos. A la SECIHTI por la beca otorgada con el número de apoyo 4024459 y al Instituto de Ciencias Químicas de la BUAP.

Referencias.

1. K. Harikesh, P. Gurudayal, D. Atul, S. A. Ravi, & K. M. Pintu. *Organic Letters*. 2020. **22**, 9258-9262.
2. Q.Y. Zhang, J. M. Xu, W. Q. Chen, Q. Wu, & X. F. Lin. *Synlett*, 2008. **19**, 679–682.
3. P. Melloni, G. Carniel, T. A. Della, A. Bonsignori, M. Buonamici, O. Pozzi, S. Ricciardi, A. C. Rossi. *Eur. J. Med. Chem.* 1984. **19**, 235– 242.

SÍNTESIS DE PIPERIDONA Y EVALUACIÓN DE SU POTENCIAL ACTIVIDAD BIOLÓGICA

María Fernanda Martínez Hernández¹, Jacqueline Jiménez Hernández¹, Víctor Gómez Calvario, Jorge R. Juárez Posadas^{1*}, Axel Esteban Carrillo Cervantes¹.

¹ Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Av. San Claudio s/n, Cd Universitaria, San Manuel, 72592 Heroica Puebla de Zaragoza, Pue. 2227013458, mh224470035@alm.buap.mx

Palabras clave: *Piperidina, piperidona, acoplamiento molecular.*

Introducción. Los compuestos lactámicos generan gran interés tanto en el ámbito sintético como en el biológico, ya que sus estructuras están presentes en numerosos alcaloides con diversas propiedades farmacológicas, entre ellas efectos analgésicos, neurolépticos y neurotrópicos, entre otros. (1)

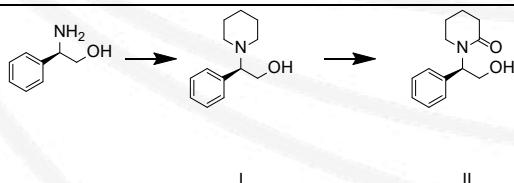
Objetivo. Realizar un estudio integral la molécula piperidona mediante la optimización de las rutas sintéticas existentes y evaluar su actividad biológica preliminar a través de análisis *in silico*, para posteriormente validar su aplicación biológica.

Metodología. La síntesis del compuesto II (Esquema 1), se llevó a cabo en un matraz de 250 mL, con una solución de piperidina derivada de (*R*)-fenilglicinol en ácido acético. Después de la disolución completa, se agregó gota a gota una solución de bromo en ácido acético. La mezcla de reacción se agitó por 20 minutos y posteriormente, se trató con una solución de NaOH para detener la reacción, controlando el pH. El producto se purificó mediante cromatografía en columna con gel de sílice.

Para evaluar su posible actividad biológica, se realizó un estudio *in silico* de acoplamiento molecular.

Resultados y discusión. La piperidona se obtuvo con un buen rendimiento, presentando indicios de posibles actividades anticancerígenas, antivirales, antiinflamatorias y antitumorales, entre otras.

El análisis de RMN de ¹H y ¹³C (Figura 1) confirmó su estructura, destacando la señal del carbonilo en 171.9 ppm en el espectro de ¹³C.



Esquema 1. Reacción para obtención de piperidona

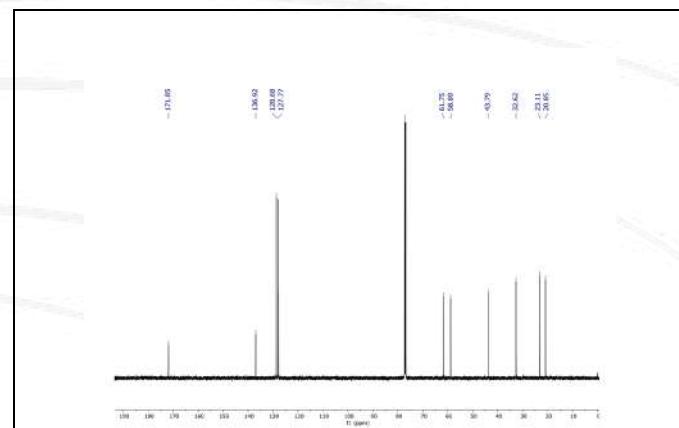


Figura 1. Espectro RMN ¹³C 125 MHz.

Conclusiones. Se obtuvo de manera satisfactoria la piperidona como un sólido cristalino blanco que servirá como materia prima para futuras reacciones. El análisis *in silico* sugiere un alto potencial antiviral y anticancerígeno.

Agradecimientos. A SECIHTI por la beca otorgada número 4016984.

Referencias.

1. C. Ande, S. Dubbu, A.K. Verma, Y.D. Vankar. *Tetrahedron Lett.* 2018, **59**, 1879-1895.
2. J.B. Calixto, A. Beirith, J. Ferreira, A. R. Santos, V.C. Filho, R. A. Yunes. *Phytother Res.* 2000, **6**, 401-18.
3. L. G. Ferreira, R. N. Dos Santos, G. Oliva, A.D. Andricopulo. *Mol.* 2015, **20**, 13384-421.
4. M.G.A. Franca, C. O.Pessoa, M.T.S. Trevisan, C.F. Paiva, D. R. Lima, A.F. Sousa, F. C. E. Olivera, A. J. Cavalheiro, M. G. V. Silva. *Nat. Prod. Res.* 2022. **36**, 4729-4733.
5. R. J. Hight. *J. Org. Chem.* 1964, **29**, 471 - 479.

SUPLEMENTOS NUTRICIONALES PARA DEPORTISTAS: ANÁLISIS POR RMN DE GELES ENERGÉTICOS

Alma L. Saucedo^{1,2*}, Benito Reyes-Trejo³, Susana Angélica Cuéllar-Moreno⁴

¹Secihi, ²UACH-LANISAF, ³UACH-Lab. Productos Naturales, ⁴ETEE ISSSTE, *Universidad Autónoma Chapingo, Carretera México-Texcoco km 38.5, Texcoco, Edo. Mex., Tel. (595) 9321500 ext. 6450, correo electrónico: alsaucedoya@secihi.mx

Palabras clave: análisis cuantitativo, identificación molecular, estándar externo.

Introducción. Para los deportistas, una adecuada alimentación e hidratación es esencial para cumplir favorablemente en entrenamientos y competencias. Sin embargo, la necesidad de cubrir la demanda energética durante el ejercicio ha dado lugar al consumo de suplementos nutricionales (bebidas, barritas, concentrados ricos en proteína, geles, etc.). Entre los suplementos más utilizados se encuentran los geles energéticos que son elaborados con carbohidratos, aminoácidos y vitaminas. En nuestro país, la falta de regulación ha dado lugar a la comercialización de múltiples productos cuya composición no está completamente declarada por el fabricante y que podrían afectar la salud de las personas que los ingieren (1).

Objetivo. Realizar un análisis por resonancia magnética nuclear (RMN) de geles energéticos como prueba inicial para verificar su composición y aportar evidencia sobre el efecto que podría tener su consumo en los deportistas.

Metodología. Se analizaron geles de energía comerciales, adicionados con D₂O al 10% (TSP 0.75%) y buffer de fosfatos 200 mM pH 4.5. El análisis de RMN se realizó en un equipo Agilent 400 MHz, se obtuvieron espectros de ¹H, COSY, HSQC, TOCSY con supresión de agua. La identificación de los compuestos se hizo con Chenomx NMR Suite M1 9.0, confirmando con datos de las bases HMDB y BMRB. La cuantificación por RMN se realizó por estándar externo: a) Se utilizó sacarosa 2 mM para determinar la concentración de la valina y el citrato a partir de las señales en 2.25 y 2.72 ppm, utilizando el software MestReNova 14.3.0 (2). b) Despues, los datos de valina y citrato se utilizaron para establecer un factor de corrección de los compuestos identificados con Chenomx NMR Suite M1 9.0 y calcular su concentración.

Resultados y discusión. La Figura 1 muestra el espectro de ¹H-RMN (presat) de un gel energético con la identificación de los componentes mayoritarios. En el Cuadro 1 se indican algunas de las concentraciones determinadas. Se encontró que los suplementos son ricos en carbohidratos: fructosa, glucosa y maltodextrina, que se asocian con desórdenes metabólicos. El alto contenido de aminoácidos ramificados (Ile, Leu, Val, β-Ala) contribuye al suministro de energía y la recuperación muscular. La taurina es ergogénica y mitiga el daño muscular. Sin embargo, combinada con cafeína y altas concentraciones de azúcares puede provocar deshidratación, alteraciones al

sistema nervioso central, aumento del ritmo cardíaco, aumento o disminución de presión arterial, náuseas, dolor estomacal, diarrea e incluso hipoglucemias.

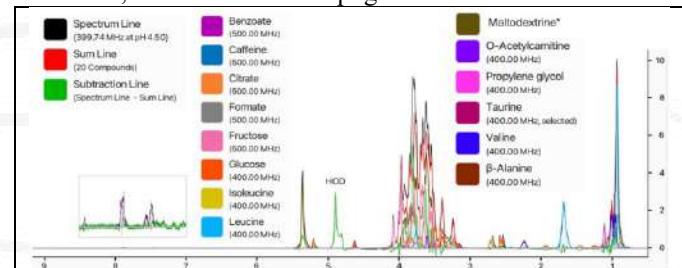


Figura 1. Espectro de ¹H-RMN (presat) de un gel energético (400 MHz, 10% D₂O al 0.75% TSP, 200 mM fosfatos pH 4.5) e identificación de compuestos con Chenomx Suite M1 9.0.

Cuadro 1. Concentración (mM) y contenido por porción (mg) de los compuestos cuantificados por RMN por el método de estándar externo en una muestra representativa de gel energético.

Compuesto	Concentración (mM)	Contenido por porción (mg)
Cafeína	1.04 ± 0.08	33.4
Fructosa	94.75 ± 13.96	3032.1
Glucosa	23.12 ± 1.22	739.8
Leucina	170.47 ± 8.81	5454.9
Maltodextrina	274.59 ± 42.02	8786.9
Taurina	13.22 ± 0.92	423.0
Valina	20.37 ± 1.84	651.7
β-Alanina	1.74 ± 0.06	55.8

Conclusiones. El análisis por RMN de geles energéticos demostró que se trata de productos con alta concentración de azúcares y aminoácidos ramificados que, además, contienen cafeína y taurina, por lo que deben ser consumidos con moderación por personas adultas. No deben ser ingeridos por niños y jóvenes debido a las alteraciones en el metabolismo que pueden causar estos compuestos a corto y largo plazo, y que al ser tan accesibles ponen en riesgo su salud.

Agradecimientos. Al CIETBIO de la UACH.

Referencias.

1. CNA, CONADE, SEP, Suplementos Deportivos, <https://cna.conade.gob.mx/documents/libros/Suplementos%20deportivos.pdf>, (revisado: 02 de agosto de 2025).
2. D. Paniagua-Vega, A. A. Huerta-Heredia, M. G. Sánchez-Otero, N. Waksman-Minsky, J. R. Lucio-Gutiérrez and A. L. Saucedo, *Magn. Reson. Chem.* 2025, **63**, 593–603.

ANÁLISIS POR RMN DE ^1H DE LAS INTERACCIONES MOLECULARES NO COVALENTES ENTRE QUERCETINA Y CLORURO DE COLINA

Jehovani Miguel Lázaro Rangel*, Zaira Domínguez, Claudia Isabel Virues Colorado, Magali Salas Reyes, Instituto de Química Aplicada, Universidad Veracruzana, Av. Dr. Luis Castelazo Ayala S/N, Col. Industrial-Animas, 91190 Xalapa-Enríquez, Ver.
228 195 9317, jehovani_98@hotmail.com.

Palabras clave: NADES, Quercetina, RMN.

Introducción. Los disolventes eutécticos profundos naturales (NADES) a base de cloruro de colina (ChCl) han demostrado un alto rendimiento en la extracción de compuestos bioactivos y en la solvatación de compuestos con baja solubilidad en agua, como la quercetina (Q). Este comportamiento se atribuye a las interacciones no covalentes establecidas entre ChCl y los solutos. Aunque se han analizado las interacciones solvente:soluto mediante RMN (1), se conoce poco sobre las constantes de asociación de complejos, como el formado entre ChCl y Q. Las titulaciones espectroscópicas por RMN de ^1H son una metodología aplicada con éxito en la determinación de constantes de asociación y puede aportar información valiosa para comprender su comportamiento.

Objetivo. Determinar, mediante RMN de ^1H , los sitios y grupos funcionales involucrados en las interacciones no covalentes que prevalecen entre Q y ChCl, así como calcular las constantes de asociación del sistema supramolecular.

Metodología. Se realizaron experimentos de asociación por RMN de protón (500 MHz) mediante titulaciones espectroscópicas, preparando soluciones, en DMSO, a diferentes proporciones molares entre Q y ChCl, manteniendo constante la concentración de una de las especies y variando la de la otra. Los cambios en los desplazamientos químicos ($\Delta\delta$) permitieron identificar los sitios de interacción intermolecular y calcular las constantes de asociación (2).

Resultados y discusión. Los experimentos de titulaciones espectroscópicas por RMN de protón entre Q y ChCl mostraron desplazamientos químicos significativos, evidenciando interacciones intermoleculares por puentes de hidrógeno. El análisis demostró que ChCl (B) se une a los sitios de interacción OH-7 (Aa) y OH-4' (Ab) de Q, determinando constantes de asociación independientes para cada uno mediante un modelo de unión 1:1:

$$K_{\text{AaB}} = 15.87 \text{ M}^{-1} \quad K_{\text{AbB}} = 8.96 \text{ M}^{-1}$$

Se evaluó un modelo considerando la posible autoasociación de ChCl, pero el ajuste fue deficiente debido a la formación de agregados de distinto tamaño, lo que sugiere un comportamiento diferente de ChCl en presencia de Q. La comparación con el trabajo de Abdi Bellau *et al.* respaldó la idea planteada de que Q actúa como receptor ditópico,

confirmando los sitios de interacción OH-7 y OH-4'. Sin embargo, no lograron determinar las constantes de asociación (3). En conjunto, los resultados confirman que el ion cloruro desempeña un papel clave en la interacción con Q, y que los modelos que incluyen dímeros no describen adecuadamente el sistema debido a la complejidad del fenómeno de autoasociación en ChCl.

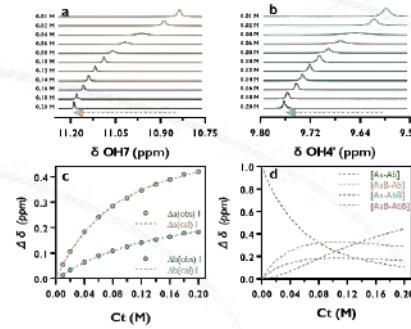


Figura 1. a) y b) Espectros de RMN de ^1H de los desplazamientos de las señales de la quercetina con el aumento de concentración de ChCl (0.01-0.20 M). c) Ajuste de mínimos cuadrados para el complejo Q-ChCl. d) Fracciones molares de las microespecies del complejo Q-ChCl a $C_t = 0.02 \text{ M}$, A denota quercetina con (a) sitios OH-7 y (b) OH-4'; B es ChCl.

Conclusiones. El cloruro de colina forma complejos con los grupos hidroxilos de la quercetina en las posiciones OH-7 y OH-4', estableciéndose en cada sitio de manera independiente. Se concluye que las constantes de asociación son distintas en cada sitio debido a la variación en la fuerza de sus interacciones, lo que explica en parte la alta solubilidad.

Agradecimientos. A SECIHTI por la beca otorgada con el Número de Apoyo: 823564.

Referencias.

- 1.N. López, I. Delso, D. Matute, C. Lafuente, M. Artal, *Food Chem.* 2020, **306** (125610), 125610.
- 2.J. M. Lázaro-Rangel, A. Sánchez, M. Inoue, J. L. Olivares-Romero, R. Meza-Gordillo, M. Salas-Reyes, C. Virués, Z. Domínguez, *European J. Org. Chem.* 2023, **26** (5), 33-42.
- 3.M. L. Abdi Bellau, O. Bortolini, G. Fantin, M. Fogagnolo, D. Ragni, I. Delso, P. Merino, *Molecules (Basel, Switzerland)*, 2018, **23** (12), 3366.

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE 7-FENIL-6-HIDROXI-1,4-OXAZEPAN-5-ONAS Y 2-[FENIL(HIDROXI)METIL]MORFOLIN-3-ONA A PARTIR DE UNA TRANS-EPOXIAMIDA DERIVADA DE LA (S)-FENILETILAMINA.

David Miguel Aparicio Solano¹, Olga Hisami Rodríguez Matsui², Alan Carrasco-Carballo², Joel L. Terán^{1,*}

¹Centro de Química, ICUAP, BUAP, Puebla, México.

²Laboratorio de Elucidación y Síntesis en Química Orgánica, CQ, ICUAP, BUAP, Puebla, México.

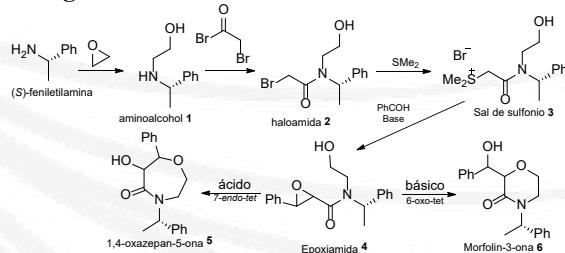
davidmiguel.aparicio@correo.buap.mx

Palabras clave: ciclación, oxazepanos, morfolinas.

Introducción. Los heterociclos quirales de seis y siete miembros que contienen nitrógeno y oxígeno son estructuras generales que se asocian clásicamente con diversas actividades biológicas.(1) Por ello, han dedicado esfuerzos al desarrollo de estrategias eficientes para su síntesis. Nuestro grupo de investigación han reportado metodologías para la obtención de dichos heterociclos nitrógenados,(2) empleando epoxiamidas quirales no racémicas.(3) Las epoxiamidas son intermediarios versátiles,(4) ofrecen una amplia gama de posibilidades sintéticas.(5) Entre ellas, el uso de la ciclación intramolecular controlada del anillo de oxirano podría proporcionar, de manera sencilla a 1,4-oxazepan-5-onas o a morfolin-3-onas compuestos con potencial interés biológico. En este trabajo, informamos que la epoxiamida **2** puede dar lugar a ambos heterocíclicos utilizando condiciones de reacción controladas (Esquema 1).

Objetivo. Sintetizar y caracterizar a través de RMN de ¹H y ¹³C la 1,4-oxazepan-5-ona **3** y la morfolin-3-ona **4**, compuestos isoméricos obtenidas de una epoxiamida quiral derivada de la (S)-feniletilamina.

Metodología.



Esquema 1 Ruta de síntesis oxazepan-5-ona **5** y morfolin-3-ona **6**.

Resultados y discusión. Se condensó a la (S)-FEA con óxido de estireno usando agua en ultrasonido para generar el aminoalcohol **1**. Después se hizo reaccionar al aminoalcohol con bromuro de bromo acetilo en CH₂Cl₂ y K₂CO₃ generando el producto de *N*-acetilación, el rendimiento para las dos etapas fue del 80%. La haloamida **2** fue condensada con SMMe₂ en CH₂Cl₂ para acceder en un 100% a la sal de sulfonio **3**, la cual fue tratada con DBU en CH₂Cl₂ para generar a las trans epoxiamidas **4** en una mezcla diastereomérica 1:1 determinada por RMN de ¹H y en un 90% rdto. En la ciclación

intramolecular en medio ácido, el mejor resultado fue al utilizar Cu(OTf)₂ y CH₃CN generando al compuesto **5** en un 95% de rdto. Para el medio básico el mejor resultado fue al usar Na^o en THF anhídrico, generando al compuesto **6** en un 95% de rdto. Para los espectros de RMN de ¹H de ambos compuestos **5** y **6** (figura 1) los desplazamientos y multiplicidades son muy parecidos, por lo que para asignarlos correctamente fue necesario el uso del experimento HMBC donde para el compuesto **5** el acoplamiento clave fue entre los H-2 y el C-7, mientras que para el compuesto **6** el acoplamiento que nos permitió asignar la estructura fue entre los H-6 y el C-2,

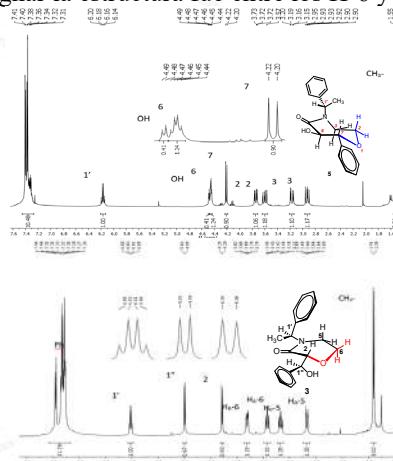


Figura 1. Espectros de RMN de ¹H de los compuestos **5** y **6**. Conclusiones.

Se sintetizaron 1,4-oxazepan-5-onas **3** y morfolin-3-onas **4** quirales en alto rendimiento, altamente funcionalizadas y regioespecíficas a partir de *trans*-epoxiamidas quirales. Esta estrategia abre un acceso a nuevos *N,O*-heterociclos.

Referencias.

1. Witjman, R.; Vink, M. K. S. *Synthesis*, 2004, **8**, 641.
2. Terán, J. L.; Gnecco, D.; Galindo, A.; Juárez, J. *Tetrahedron: Asymmetric* 2001, **12**, 357.
3. Aparicio, D. M.; Terán, J. L.; Gnecco, D. *Tetrahedron: Asymmetric* 2009, **20**, 2764.
4. Saravia, F. *Org. Chem.* 2008, **73**, 8979
5. Valpuesta-Fernández, M.; Durante Lanes. *Tetrahedron Lett.* 1995, **36**, 4681

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN MEDIANTE RMN DE BIOCONJUGADOS DE DIOSGENINA: BzDg, nOHBzDg Y nOBnBzDg

Luz María Fuentes Cortes^{1*}, Juan Alex Hernández Rivera¹, M. Elena Hernández-Caballero², Ivonne Pérez-Xochipa³, Alan Carrasco Carballo¹

¹Laboratorio de Elucidación y Síntesis en Química Orgánica, ICUAP-BUAP, Puebla, México

²Facultad de Medicina, BUAP, Puebla, México

³Facultad de Ciencias Químicas, BUAP, Puebla, México

*fc202326594@alm.buap.mx, 2229098220

Palabras clave: RMN, Diosgenina, esterificación.

Introducción.

La resonancia magnética nuclear (RMN) es una técnica analítica que utiliza un campo magnético para identificar la estructura molecular de una muestra (1). Esta información es obtenida principalmente mediante la interpretación de espectros de ¹H y ¹³C (2). La bioconjugación es el proceso de unión de una biomolécula con una molécula para formar un nuevo compuesto, cuyas aplicaciones figuran en el ámbito biomédico, ambiental, alimentario, entre otros (3). La Diosgenina es un esteroide con múltiples actividades farmacológicas (4); su estructura y el grupo hidroxilo en C-3 permiten su modificación mediante reacciones de esterificación (figura 1). Este trabajo analiza el papel de la RMN en la caracterización de bioconjugados de Diosgenina con ácidos hidroxibenzoicos, ya que esta técnica es fundamental para la elucidación estructural en el estudio de esteroides.

Objetivo. Caracterizar mediante espectroscopía de RMN los ésteres de Diosgenina sintetizados a partir del ácido benzoico e hidroxibenzoicos.

Metodología.

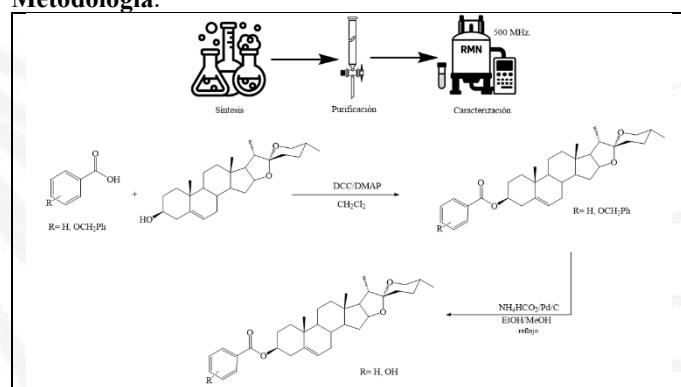


Figura 1. Ruta de síntesis y obtención de espectros de RMN.

Resultados y discusión. El principal cambio en los espectros ocurre en el desplazamiento de H-3 de la Dg, donde se lleva a cabo la esterificación. Sin embargo, la unión con ácido benzoico y sus derivados hidroxilados (*ortho*, *meta* y *para*) provoca variaciones en los desplazamientos químicos de otras posiciones mostradas en la Tabla 1. Adicional a eso es posible observar la aparición de 3' en el espectro de ¹³C correspondiente al carbono de carbonilo, confirmando la presencia formación del éster. Mismo caso para la presencia

o ausencia del metileno bencílico, indicando la protección o desprotección de los ácidos hidroxibenzoicos con sus señales características tanto en ¹H como en ¹³C.

Tabla 1. Desplazamiento químico de átomos significativos.

Compuesto	¹ H	δ (ppm)	¹³ C	δ (ppm)
Dg	3	3.53	3	71.88
	6	5.35	6	121.44
BzDg	3	4.70	3	74.50
	Ar4	7.38	3'	166.02
	Ar3	7.27	Ar4	132.77
	Ar2	7.89	Ar3	128.30
2OBnBzDg	3	4.86	3	74.48
	Ar2	5.38	3'	166.11
	Bn	5.15	Ar2	157.90
2OHBzDg	3	4.78	3	80.61
	6	5.34	3'	169.48
			Ar2	161.92
3OBnBzDg	3	4.77	3	74.63
	Bn	5.03	3'	165.80
			Ar3	158.70
3OHBzDg	3	4.69	3	74.10
			3'	165.40
			Ar3	157.41
4OBnBzDg	3	4.75	3	74.20
	Bn	5.04	3'	165.66
			Ar4	162.38

Conclusiones. El uso de la RMN juega un papel fundamental en la caracterización de derivados esteroidales, ya que en este caso ha permitido observar los cambios estructurales específicos originados por la esterificación de la Diosgenina con ácido benzoico y sus derivados hidroxilados. A través del análisis espectral fue posible identificar las modificaciones químicas realizadas, confirmando la formación de los correspondientes ésteres.

Referencias.

1. G. S. Rule and T. K. Hitchens, *Fundamentals of Protein NMR Spectroscopy*, Springer Science & Business Media, 2006
2. M. A. G. González, E. S. Mendonza, N. H. W. Minsky and A. L. Saucedo, *Educ. Quím.* 2022, **33**, 3–13.
3. U. Dutta, M. J. Goswami and D. Kakati, in *Comprehensive Analytical Chemistry*, eds. S. K. Verma and A. K. Das, Elsevier, 2023, vol. 102, pp. 93–121.
4. C. Liu, X. Ma, J. Zhuang, L. Liu and C. Sun, *Pharmacol. Res.* 2020, **160**, 105062.

CARACTERIZACION ESTRUCTURAL POR RMN DE PRODUCTOS DE SN₂ EN DERIVADOS DE ALLOPREGNANOLONA

Uriel Aca Márquez¹, Ivone Perez-Xochipa², Marta Elena Hernández-Caballero³, David M. Aparicio Solano⁴, Alan Carrasco Carballo¹

¹Laboratorio de Elucidación y Síntesis en Química Orgánica, CQ, ICUAP, BUAP, Puebla, México.

²Facultad de Ciencias Químicas, BUAP, Puebla, México.

³Biomedicina, Facultad de Medicina, BUAP, Puebla, México.

⁴Centro de Química, ICUAP, BUAP, Puebla, México.

am202360275@alm.buap.mx

Palabras clave: caracterización, síntesis, esteroides.

Introducción. La resonancia magnética nuclear (RMN) es una herramienta fundamental para la elucidación estructural de compuestos orgánicos (1), especialmente en sistemas complejos como los esteroides, donde pequeñas modificaciones pueden generar importantes variaciones en la actividad biológica. En este trabajo se estudian reacciones de sustitución nucleofílica bimolecular en el bromoacetato de allopregnanolona (allopreg), un derivado funcionalizado de este esteroide. La RMN resulta particularmente valiosa en el estudio de esteroides funcionalizados, ya que permite diferenciar con precisión entre productos estructuralmente similares y detectar cambios sutiles en la molécula. (2,3)

Objetivo. Caracterizar por RMN los productos de sustitución nucleofílica obtenidos a partir de allopregnanolona.

Metodología. La caracterización se realizó mediante espectroscopía de RMN 1D (¹H, ¹³C) y 2D (HSQC, HMBC y COSY) en un equipo de 500 MHz usando cloroformo deuterado como disolvente, como se ilustra en la figura 1.

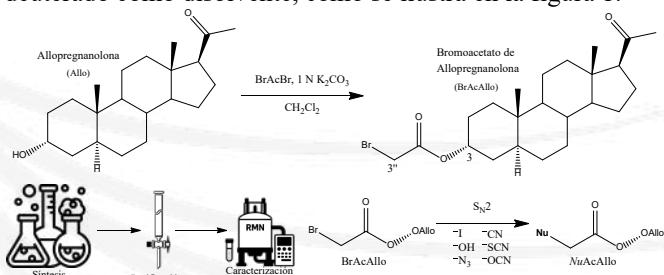


Figura 1. Diagrama de metodología empleada para obtener los diferentes derivados de allopregnanolona.

Resultados y discusión. El análisis espectroscópico por RMN permitió identificar con claridad las modificaciones estructurales derivadas de la sustitución nucleofílica en el C-3 del esqueleto esteroide. En particular, para los derivados obtenidos con los nucleófilos OCN⁻, SCN⁻ y CN⁻, se observó la aparición de una nueva señal en el espectro de ¹³C atribuida al carbono del grupo funcional introducido, lo cual confirmó la incorporación efectiva del nucleófilo. Además, el análisis del espectro de ¹H mostró que el desplazamiento químico del grupo metíleno (–CH₂–) directamente enlazado al nucleófilo, varía de manera sistemática dependiendo del nucleófilo

utilizado. Esta sensibilidad refleja las diferencias en la densidad electrónica y el ambiente químico generado por cada nucleófilo, permitiendo distinguir con claridad los distintos productos obtenidos. Los experimentos 2D (HSQC y HMBC) fueron fundamentales para corroborar que los cambios observados en los protones del metíleno están en correspondencia directa con desplazamientos del carbono al que están enlazados. Al comparar los derivados con CN⁻ y N3⁻, se observó que los protones del metíleno aparecen a 4.65 ppm y 3.83 ppm respectivamente, correlacionando en HSQC con carbonos a 60.3 ppm y 50.6 ppm. Esta diferencia notable en los valores de desplazamiento refleja el efecto electrónico específico de cada nucleófilo sobre el entorno del grupo metíleno, y pone en evidencia como la naturaleza del sustituyente modifica tanto al carbono como a sus protones adyacentes. Los desplazamientos de protones y carbonos en C-3 y C-3'' se resumen en la Tabla 1, donde se observan las variaciones según el nucleófilo.

Tabla 1. Desplazamientos químicos en derivados de allopregnanolona obtenidos por sustitución nucleofílica.

Compuesto	Desplazamiento químico (ppm)			
	¹ H	¹³ C	¹ H	¹³ C
Allo	3.59	71.3	3	3''
Br	4.76	75.9	3.79	26.6
I	4.72	75.5	3.65	- 4.3
N ₃	4.80	50.6	3.83	75.6
OH	4.82	60.9	4.10	75.4
CN	4.80	60.3	4.65	75.3
SCN	4.81	35.5	3.73	76.8

Conclusiones. La espectroscopía de RMN permitió confirmar los cambios estructurales tras la sustitución nucleofílica del bromo-acetato de allopregnanolona. Los espectros 1D y 2D evidenciaron desplazamientos consistentes en los protones y carbonos del metíleno enlazados al nucleófilo, lo que permitió diferenciar cada derivado.

Referencias.

1. M. A. García, E. Sanchez, N. H. Waksman. A. L. Saucedo, *Educ. Quím.* 2022, 33, 3-13.
2. S. L. Laurella, *Resonancia magnética nuclear*, Editorial de la Universidad Nacional de La Plata, La Plata, 2017.
3. J. Borloz, I. Cespedes, *Tecnología en marcha*, 2024, 37, 48-76.

BIOCONJUGADOS 3-AMINOESTERES ESTEROIDALES DE 17 α -HIDROXIPREGNENOLONA: CARACTERIZACIÓN MEDIANTE RMN ^1H Y ^{13}C

Hannia Ramírez-Machado¹, Guiee N. Lopez-Castillo¹, Marta Elena Hernández-Caballero², Joel L. Teran³, Alan Carrasco-Carballo¹

¹Laboratorio de Elucidación y Síntesis en Química Orgánica, ICUAP, BUAP, Puebla México.

²Facultad de Medicina, BUAP, Puebla México.

³Centro de Química, ICUAP, BUAP, Puebla México.

hannia.ramirezm@alumno.buap.mx

Palabras clave: 17 α -hidroxipregnolona, bioconjugados aminoesteroidales

Introducción. La 17 α -hidroxipregnolona es un esteroide endógeno, intermediario clave en la biosíntesis de esteroides sexuales (1), con relevancia en la regulación hormonal y procesos neurológicos (2). Presenta dos grupos hidroxilo, siendo el del C-3 un sitio estratégico para su funcionalización química (3). Por otro lado, los bioconjugados aminoesteroidales destacan por su versatilidad estructural que han mostrado potencial como agentes anticancerígenos, antimicrobianos, antioxidantes, neuroprotectores y antiarrítmicos (4). Por lo tanto, la bioconjugación de la 17 α -hidroxipregnolona con ftaloil aminoácidos tienen potencial para generar derivados con mejor biodisponibilidad, selectividad celular y estabilidad, facilitando su interacción con blancos moleculares de interés terapéutico.

Objetivo. Identificar señales en RMN ^1H y ^{13}C para confirmar la obtención de bioconjugados aminoesteroidales a partir de la esterificación entre 17 α -hidroxipregnolona y aminoácidos alifáticos.

Metodología.

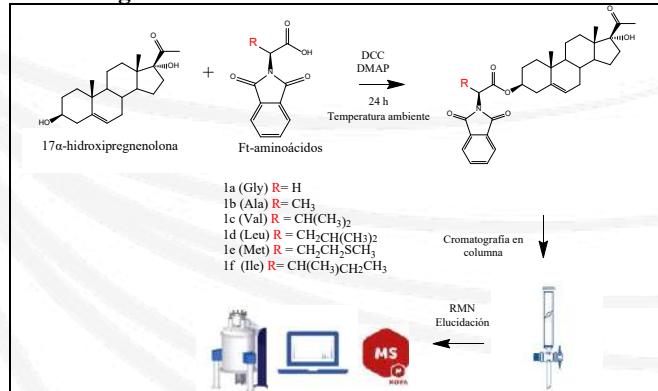


Figura 1. Metodología de síntesis, purificación y caracterización de bioconjugados aminoesteroidales.

Resultados y discusión. Entre los bioconjugados aminoesteroidales (Figura 1) se puede observar que en los espectros de RMN- ^1H no hay un desplazamiento significativo entre los diferentes aminoácidos en las señales H-3 y H-6. Las diferencias radican entre las señales del protón del carbono α del aminoácido y en los protones del sustituyente (Tabla 1), además que, durante el proceso de esterificación no se perdió

la pureza enantiomérica de los fragmentos. Esta misma tendencia se observa en las señales en los espectros de ^{13}C (Tabla 2).

Tabla 1. Resumen de señales de RMN de ^1H características para los bioconjugados 1a-d y la materia prima (MP).

Compuesto	Desplazamiento en ppm			
	H-3	H-6	H- αC	H _R
MP	3.53	5.35	-	-
Ft-Gly-St	4.61	5.29	4.34	-
Ft-Val-St	4.60	5.29	4.49	0.81-0.89
Ft-Ala-St	4.60	5.29	4.48	1.70
Ft-Met-St	4.60	5.29	4.75	2.02, 2.59, 2.38

Tabla 2. Resumen de señales de RMN de ^{13}C características para los bioconjugados 1a-d y la materia prima (MP).

Compuesto	Desplazamiento en ppm			
	C-3	C-3'	αC	C _R
MP	71.61	-	-	-
Ft-Gly-St	75.66	167.62	40.59	-
Ft-Val-St	75.16	167.79	75.09	21.02, 19.44
Ft-Ala-St	75.24	167.79	55.44	15.73
Ft-Met-St	73.61	167.85	60.5	28.0, 30.3, 15.4

Conclusiones. La obtención de los bioconjugados aminoesteroidales se corroboró mediante el uso de RMN con espectros tanto 1D como 2D lo que permitió su caracterización siendo esencial para posteriores evaluaciones que permitan determinar su bioactividad.

Referencias.

- V. D. Handratta, T. S. Vasaitis, V. C. O. Njar, L. K. Gedija, R. Kataria, P. Chopra, D. Newman, R. Farquhar, Z. Guo, Y. Qiu and A. M. H. Brodie, *J. Med. Chem.*, 2005, **48**, 2972-2984.
- M. Vallée, *Front. Neuroendocrinol.*, 2024, **72**, 101113.
- S. D. Burris-Hiday and E. E. Scott, *Mol Cell Endocrinol.*, 2021, **528**, 111261.
- R. Bansal, A. Suryan, *Bio. Med. Chem. Au.*, 2022, **2**, 340-369.

USO DEL NaBH₄ COMO AGENTE REDUCTOR EN LA SÍNTESIS DEL 2-BUTIL-1H-PIRROL CARACTERIZADO MEDIANTE RMN DE ¹H Y ¹³C.

José Manuel Cíntora Rivera, José Alvano Pérez Bautista, Omar Cortezano Arellano*

Instituto de Ciencias Básicas, Universidad Veracruzana, Luis Castelazo Ayala, Col. Industrial Ánimas, CP 91190, Xalapa, Ver., México. Tel. (228) 842 1700 Ext. 13165
bvjosemanuelcintorarivera@gmail.com.

Palabras clave: pirrol, reducción, building block.

Introducción. El 2-butil-1H-pirrol **3** es un “building block” empleado en la construcción de productos naturales como la *parvistemonine A*. (1) Una de las maneras más eficaces para preparar este fragmento estructural es mediante la reducción de su precursor la 1-(1H-pirrol-2-il) butan-1-ona **2**. Para ello, el NaBH₄ es un agente reductor eficaz del intermediario **2**. En este trabajo desarrollamos la síntesis de **3** y para corroborar su obtención hicimos uso de análisis de RMN de ¹H y ¹³C. (2)

Objetivo. Sintetizar 2-butil-1H-pirrol **3** a través de la reducción de la 1-(1H-pirrol-2-il) butan-1-ona **2** empleando NaBH₄ y caracterizarlo mediante análisis de RMN de ¹H y ¹³C.

Metodología. En esta síntesis utilizamos al 1H-pirrol **1** obtenido comercialmente como sustrato de partida el cual fue transformado al correspondiente 2-acilpirrol **2** a través de una reacción de acilación de Friedel-Crafts posteriormente sometimos a **2** a un tratamiento reductor con NaBH₄ obteniendo de esta manera a **3** con buenos rendimientos. El compuesto **3** después de ser purificado por cromatografía de columna flash se analizó mediante análisis de RMN de ¹H y ¹³C empleando un equipo de RMN Brucker de 500 y 125 MHz y como disolvente CDCl₃.

Resultados y discusión. El primer paso en nuestro trabajo de síntesis fue acilar al 1H-pirrol **1** en C2 al ser tratado con AlCl₃ y cloruro de butirilo de acuerdo con el protocolo de Weber para acceder de esta manera a la 1-(1H-pirrol-2-il) butan-1-ona **2** (Figura 1). (3)

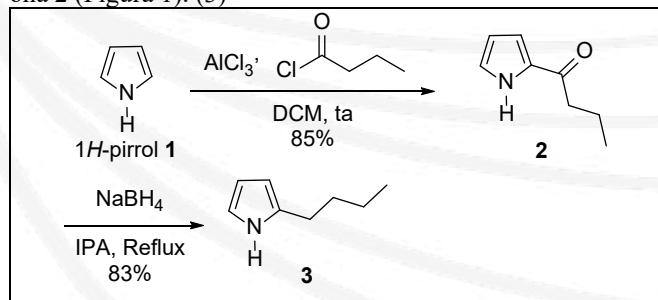


Figura 1. Síntesis del 2-butilpirrol **3** a partir del 1H-pirrol **1**.

Posteriormente transformamos el precursor **2** al 2-butil-1H-pirrol **3** mediante la remoción de su átomo de oxígeno. Este proceso de reducción lo conseguimos sometiendo a **2** a un tratamiento térmico con excesos de NaBH₄ en 2-propanol (Figura 1).

Después de purificar al producto de reducción **3** lo analizamos mediante RMN de ¹H observando en su espectro dos señales triplete ($\delta = 2.61$ y $\delta = 0.94$ ppm) y dos señales multiplete ($\delta = 1.62$ y $\delta = 1.39$ ppm) correspondientes al *n*-butilo sustituyente en C2. Además, en el espectro de RMN de ¹³C observamos la desaparición de la señal singlete ($\delta = 191.2$ ppm) correspondiente al carbono de carbonilo del precursor **2**. También, los datos espectroscópicos son consistentes con los reportados en la literatura (Figura 2). (1)

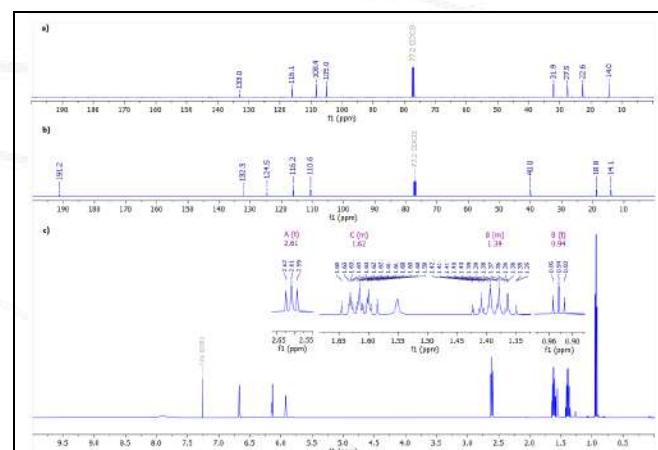


Figura 2. a) espectro de RMN de ¹³C y c) espectro de RMN de ¹H del producto **3**. b) espectro de RMN de ¹³C del intermediario **2**.

Conclusiones. Sintetizamos al 2-butil-1H-pirrol **3** mediante un proceso de reducción con NaBH₄ de la 1-(1H-pirrol-2-il) butan-1-ona **2** en un rendimiento del 83% y realizamos su caracterización por medio de experimentos de RMN de ¹H y ¹³C.

Agradecimientos. Al Dr. Oscar García Barradas y la Q.C. Guadalupe Adriana Vásquez Reyes del IQA, UV por su apoyo con los análisis de RMN.

Referencias.

1. R. Matsuo, A. Miyashita, M. Kuwabara, S. Adachi, A. Matsuzawa, K. Sugita, *Synlett*, 2020, **31**, 1800–1804.
2. R. Greenhouse, C. Ramirez, J. M. Muchowski, Joseph M. Muchowski, *J. Org. Chem.* 1985, **50**, 2961–2965.
3. T. M. Weber, A. Leyens, L. Berning, B. Stork, J. Pietruszka, *Catal. Sci. Technol.* 2023, **13**, 6165.

RESOLUCIÓN Y ASIGNACIÓN DE LA CONFIGURACIÓN ABSOLUTA DE *CIS*-2,3-DIHIDROBENZOFURANOS UTILIZANDO AGENTES DE DERIVATIZACIÓN QUIRAL (ADQ)

Diego Andrade Marcial,¹ Omar Cortezano Arellano,² Myrna Hernández Matus,³ Arturo Coaviche Yoval,⁴ Ricardo Tovar Miranda^{2*} MQB¹, ICB², IQA³, FQFB⁴. Universidad Veracruzana. Av. Dr. Luis Castelazo Ayala s/n, Col. Industrial Animas CP 91190, Xalapa-Enríquez, Ver. México. Tel. 2288421700. Ext. 13930. rtovar@uv.mx.

Palabras clave: 2,3-dihidrobenzofuranos, ADQ, análisis conformacional, diastereoisómeros.

Introducción. La espectroscopía de resonancia magnética nuclear (RMN), es una técnica analítica poderosa para determinar la estructura de compuestos orgánicos y su uso ha tomado gran relevancia para la asignación de configuraciones absolutas utilizando reactivos quirales como ADQ que causan perturbaciones específicas y predecibles en el espectro de RMN-¹H (1). Adicionalmente, con la ayuda de métodos computacionales se pueden predecir las preferencias conformacionales de diastereoisómeros producto de la derivatización de racematos con ADQ (2-3). En este trabajo se presentan los avances en la síntesis (4), resolución y asignación de la configuración absoluta de los ácidos *cis*-(\pm)-1.

Objetivo. Sintetizar la mezcla racémica de 1, resolverla utilizando ADQ y asignar la configuración absoluta de los diastereoisómeros 2a-b mediante RMN-¹H.

Metodología. Se preparó la mezcla racémica del ácido *cis*-(\pm)-1a a partir de la hidrogenación catalítica, con Pd/C del intermediario aromático ácido 2-(acetamidometil)benzofurano-3-carboxílico (5a). Para resolver y asignar la configuración absoluta de los estereoisómeros de (\pm)-1, se planteó realizar la síntesis de los derivados 2a-b utilizando dos ADQ (Figura 1).

Figura 1. Estrategia para la resolución de 1 utilizando ADQ.

Por otro lado, para predecir la utilidad de 3 y 4 como ADQ en la asignación de la configuración absoluta de los centros estereogénicos C2 y C3 en 2a-b, se realizó el modelado molecular con una preoptimización con PM3 y optimización geométrica mediante cálculos de funcional de la densidad (DFT) en el nivel de teoría M06-2X/cc-PVTZ.

Resultados y discusión. Se realizó la síntesis y caracterización del éster metílico de (\pm)-1a con un rendimiento global del 5%. Además, se está llevando a cabo la síntesis de (\pm)-1b, los productos e intermediarios han sido caracterizados por RMN (Figura 2).

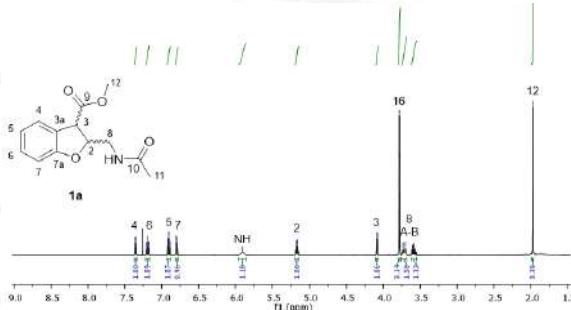


Figura 2. RMN ¹H del compuesto (\pm)-1a (500 MHz, CDCl₃).



También se obtuvieron geometrías optimizadas de 2b con los (+) y (-) pantolactona y metilbencilamina (Figura 3).

Figura 3. Geometría de mínima energía de 2b con (+)-metilbencilamina.

Conclusiones. Se logró sintetizar y caracterizar la mezcla racémica (\pm)-1a. Del mismo modo, se logró la obtención de las geometrías optimizadas de las estructuras 2a-b

Agradecimientos. Laboratorio de química teórica y computacional del IQA-UV. QC Guadalupe Vásquez Reyes del IQA-UV; Dr. José Luis Olivares Romero del INECOL

Referencias.

1. T. J. Benzel, *Tetrahedron: Asymmetry*. 2017, **28**, 1212-1219.
2. O. R. Suárez-Castillo, M. Meléndez-Rodríguez, L. E. Castelán-Duarte, E. A. Zúñiga-Estrada, J. Cruz-Borbolla, M. S. Morales-Ríos, P. Joseph-Nathan, *Tetrahedron: Asymmetry*. 2011, **22**, 2085-2098.
3. O. R. Suárez-Castillo, M. Meléndez-Rodríguez, L. E. Castelán-Duarte, M. Sánchez-Zavala, E. Rivera-Becerril, M. S. Morales-Ríos, P. Joseph-Nathan, *Tetrahedron: Asymmetry*. 2009, **20**, 2374-2389.
4. A. Coaviche-Yoval, J. G. Trujillo-Ferrara, M. A. Soriano-Ursua, E. Andrade-Jorge, L. A. Sánchez-Labastida, H. Luna, R. Tovar-Miranda, *Amino Acids*. 2022, **2022**, 215-228.

SÍNTESIS Y ELUCIDACIÓN DE HIDRAZONAS DERIVADAS DE ALDEHIDOS AROMÁTICOS

Jorge R. Belchez Rodríguez^{*1,2}, Joel L Terán², Alan Carrasco Carballo¹.

¹Laboratorio de Elucidación y Síntesis en Química Orgánica, CQ, ICUAP, BUAP, Puebla, México.

²Centro de Química, Instituto de Ciencias, ICUAP, BUAP, Puebla, México.

jorge.belchezr@alumno.buap.mx

Palabras clave: Hidrazone, caracterización, piridinio.

Introducción. Las hidrazonas usualmente se sintetizan a partir de la condensación de hidracina y un aldehído o cetona. Su aplicación sintética es de gran valor, como intermediario es posible construir heterociclos de nitrógeno con aplicaciones farmacológicas (1). Recientemente, han sido utilizadas en la bioconjugación con biomoléculas como método de marcaje (2).

Estructuralmente, debido a que pueden presentar isómeros *E/Z*; permite en algunos casos observar la isomerización a través de la rotación del enlace C=N (3).

En este trabajo se sintetizaron sales de piridinio de hidrazonas (Figura 1) provenientes de aldehídos aromáticos. Se empleó RMN de ¹H y ¹³C para elucidar la estructura y con experimentos de 2D se identificó la configuración de las moléculas.

Objetivo. Determinar la estructura de las sales de piridinio derivadas de hidrazonas aromáticas mediante RMN de 2D.

Metodología.

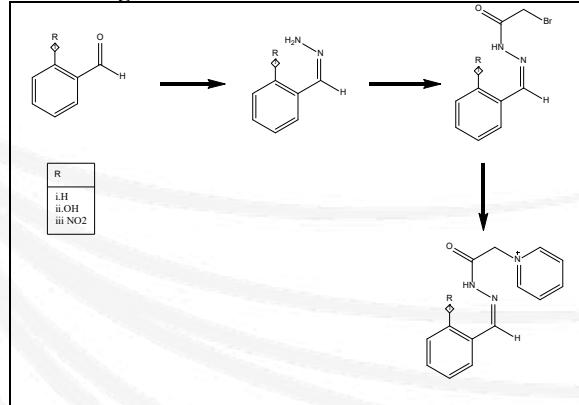


Figura 1. Ruta sintética para la obtención de las sales de piridina de hidrazonas.

Resultados y discusión Se obtuvieron los espectros de RMN-¹H y ¹³C, empleando un equipo de RMN de 500 MHz, de los intermediarios de la reacción hasta la sal de piridinio para corroborar la formación de cada molécula. En los espectros de ¹³C se observó el desplazamiento de la señal del carbono del aldehído de aproximadamente 192 ppm a 161 ppm comprobando la formación de la hidrazone. Los hidrógenos de la amina (NH₂) se encuentran en 4.99 y 5.55 ppm para el compuesto **2i** y **2ii** respectivamente. En la bromoacetilación se observan señales simples para los metilenos alfa al bromo.

En la formación de las sales se observan señales en el rango de 8.5 a 8.8 ppm asignadas al anillo de la piridina acoplado a la molécula.

Los desplazamientos químicos de los hidrógenos de la serie de compuestos se encuentran resumidos en la tabla 1.

Tabla 1. Desplazamientos químicos de los protones de los compuestos de la ruta sintética

Materia prima	Señales	Aldehído	Hidrazone	Amida	Sal de piridinio
Benzaldehído	COH	10.03	-	-	-
	CNH	-	8.71	8.71	8.17
	H2	7.9	7.88	7.88	8.07
	H3	7.54	7.49	7.49	8.02
	H4	7.64	7.49	7.49	7.43
	Py2	-	-	-	8.59
	Py3	-	-	-	8.72
	Py4	-	-	-	8.53
	CH2	-	-	4.37	5.28
Salicilaldehído	COH	9.9	-	-	-
	CNH	-	8.93	*	8.68
	H3	7	6.99	*	6.98
	H4	7.54	7.40	*	7.41
	H5	7	6.99	*	6.98
	H6	7.50	7.63	*	7.70
	Py2	-	-	-	9.02
	Py3	-	-	-	8.72
	Py4	-	-	-	9.02
	CH2	-	-	*	5.55

*Compuesto no estable.

Conclusiones. El empleo de la resonancia magnética nuclear de una y dos dimensiones permitió la identificación de las sales de piridinio y se determinó la configuración obtenida tras las síntesis de estas.

Referencias.

- Y. Lv, J. Meng, C. Li, X. Wang, Y. Ye and K. Sun, *Advanced Synthesis & Catalysis*, 2021, **363**, 5235–5265.
- D. K. Kölmel and E. T. Kool, *Chem Rev*, 2017, **117**, 10358–10376.
- S. M. Landge, E. Tkatchouk, D. Benítez, D. A. Lanfranchi, M. Elhabiri, W. A. I. Goddard and I. Aprahamian, *J. Am. Chem. Soc.*, 2011, **133**, 9812–9823.

SÍNTESIS, ESTUDIO ESTRUCTURAL MEDIANTE RMN Y PROPIEDADES ANTIPROLIFERATIVAS DE DOS ENANTIÓMEROS DERIVADOS DEL β -NAFTOL

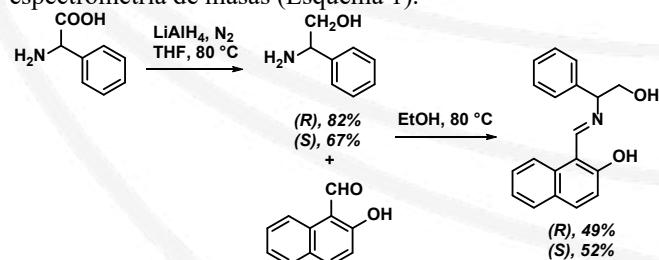
Maritza Mendoza de la Cruz, Shiomara Gadsden Andrade, Gabriela A. Sosa Ortiz, Tomás Guerrero*, Universidad Veracruzana, Instituto de Ciencias Básicas, Dr. Luis Castelazo Ayala s/n, Col. Industrial Áimas, Xalapa, Ver. 91190, México. E-mail: mari_tza1999@outlook.es tguerrero@uv.mx.

Palabras clave: Base de Schiff, aminoalcohol enantiopuro, RMN, COSY, DFT.

Introducción. Las bases de Schiff son compuestos versátiles, que se obtienen de manera relativamente sencilla a partir de materiales primas comerciales o fácilmente obtenidas mediante métodos sintéticos y que exhiben una enorme cantidad de propiedades tanto biológicas como en materiales. En cuanto a la parte biológica, las bases de Schiff exhiben propiedades antiinflamatorias, antivirales, antibacterianas y antiproliferativas entre otras. En el área de materiales han sido ampliamente estudiadas como ligantes bi y tridentados encontrando estas moléculas en el diseño de sistemas catalíticos, dispositivos optoelectrónicos, etc. (1) En ese sentido las bases de Schiff derivadas de α -aminoácidos enantiopuros son un objetivo sintético muy interesante ya que permiten evaluar el rol que juega la quiralidad en la actividad biológica o evidenciar la importancia de la configuración absoluta del centro estereogénico para inducir quiralidad en procesos catalíticos, de esta manera la preparación y caracterización espectroscópica de estos compuestos es una tarea muy importante para el diseño de nuevas aplicaciones.

Objetivo. Sintetizar, realizar la elucidación estructural y evaluar la actividad antiproliferativa de dos enantiómeros de bases de Schiff derivadas del β -naftol.

Metodología. Se redujeron la *R* y *S*-fenilglicina en presencia de hidruro de litio-aluminio y los aminoalcoholes enantiopuros se condensaron en condiciones estequiométricas con el 2-hidroxi-1-naftaldehído obteniendo las bases de Schiff correspondientes de manera cuantitativa como sólidos cristalinos los cuales fueron caracterizados mediante resonancia magnética nuclear en disolución, infrarrojo y espectrometría de masas (Esquema 1).



Esquema 1 Síntesis de dos enantiómeros de bases de Schiff derivadas del β -naftol

Resultados y discusión. La síntesis procede conforme a lo esperado. Los experimentos de RMN, en especial el experimento COSY muestra un acoplamiento inesperado entre el protón imínico y el núcleo de hidrógeno del centro estereogénico (Fig 1).

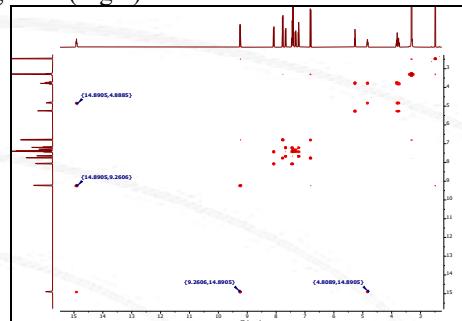


Figura 1. Espectro COSY (500 MHz, DMSO-d6) de una base de Schiff enantiopura

Se recurrió a cálculos DFT para modelar un confórmero que explique el acoplamiento observado. Posteriormente se realizó la evaluación de actividad antiproliferativa mediante MTT encontrando excelentes resultados frente a líneas celulares de cáncer de útero.

Conclusiones. Se logró la síntesis y caracterización completa de dos bases de Schiff enantiopuras y con buena actividad frente a línea celular de cáncer de útero, la configuración del carbono quiral no influye en la actividad biológica. Se logró su caracterización incluyendo acoplamientos a larga distancia con COSY que dan prueba del ambiente electrónico del sistema, cálculos DFT fueron realizados para racionalizar lo observado.

Agradecimientos.

A SECIHTI por las becas correspondientes: MMC (1223502) y GASO (Postdoctorado). A O. García-Barradas y G. A. Vásquez-Reyes por la RMN. Al Laboratorio Nacional de Supercómputo del Sureste de México, Seчиti.

Referencias.

1. L. Lv, T. Zheng, L. Tang, Z. Wang, W. Liu, *Coord. Chem. Rev.*, 2025, **525**, 216327.

ANÁLISIS POR RMN DE ^{13}C EN ESTADO SÓLIDO DEL ENSAMBLAJE DE CELULOSA BACTERIANA A PARTIR DE D-GLUCOSA- $^{13}\text{C1}$ MARCADA Y SU EFECTO DE LA ADICIÓN DE ETANOL Y GLICEROL

Brenda Gisella Curiel-Oлагue^a, Yolanda González-García^a, Juan Carlos Meza-Contreras^a

Ricardo Manríquez-González*^a

^a Departamento de Madera, Celulosa y Papel, Universidad de Guadalajara, Km 15.5. Carretera Guadalajara-Nogales. Guadalajara 45020, México (33) 3682 0110

brenda.curiel1930@alumnos.udg.mx

Palabras clave: *Komagataeibacter xylinus*, celulosa bacteriana, glucosa marcada

Introducción. Las bacterias Gram-negativas, como *Komagataeibacter xylinus*, son una de las principales fuentes de celulosa bacteriana (CB) y modelo de estudio por sus altos rendimientos. Esta cepa emplea distintas vías metabólicas según la fuente de carbono. Su fuente principal es la glucosa, su biosíntesis sigue: 1) fosforilación de la glucosa, 2) isomerización de glucosa-6-fosfato a glucosa-1-fosfato, 3) síntesis de UDP-glucosa y 4) polimerización de UDP-glucosa (3). Las rutas para otras fuentes de carbono aún no se comprenden del todo. Durante la formación de CB, parte de la glucosa se desvía a subproductos y a la obtención de energía, lo que reduce el rendimiento. Además, no está del todo claro cómo es que se ensamblan las unidades de glucosa en las cadenas de celulosa bacteriana en el proceso final de biosíntesis. Por otra parte, la adición de etanol o glicerol puede proveer otra fuente de energía, lo que evita que compita en esta función con la fuente de carbono como la glucosa que se requiere para la parte estructural del polímero.

Objetivo. Determinar el ensamblado de las cadenas de celulosa bacteriana utilizando glucosa marcada en posición C1 (^{13}C) para seguir su incorporación al polímero por RMN de ^{13}C , así como la influencia del etanol y el glicerol como fuente de energía en la biosíntesis de ésta.

Metodología. En un medio HS se mezclarán etanol y glicerol con glucosa marcada en la posición 1 ($^{13}\text{C1}$), utilizada como fuente principal de carbono y sensor de cambios estructurales durante la formación de celulosa bacteriana (CB). Si *K. xylinus* incorpora unidades de glucosa derivadas del etanol y glicerol en las cadenas de CB, esto podrá detectarse mediante espectroscopía de RMN de ^{13}C en estado sólido. Esta técnica, permite identificar claramente el enriquecimiento isotópico a través de los patrones de intensidad de señal sensor del C1(marcada con ^{13}C) en la celulosa.

Resultados y discusión. La adición de glucosa marcada en posición 1 ($^{13}\text{C1}$) confirma que el ensamblaje de la celulosa bacteriana se lleva en forma de bloques ya que la mayor intensidad en el espectro de RMN ^{13}C corresponde al carbono marcado (C1) lo que coincide con las propuestas Fig. 1a y que se aprecia con el espectro obtenido en Fig. 1b.

El etanol puede generar ATP adicional que favorece el crecimiento celular, y al aporte de energía (4), lo que reduce el uso de glucosa para este fin. En cambio, el glicerol, si mostró competencia en la formación estructural de la celulosa bacteriana (5). Esto se observa en la disminución de la señal del C1 en el espectro de carbono de la celulosa bacteriana.

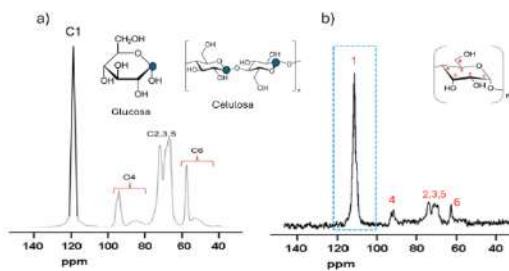


Figura 1. Espectros de RMN- ^{13}C del posible escenario: a) ensamblado en bloques de la glucosa en la CB. b) Resultado de la CB marcada con ^{13}C en C1 que coincide con el escenario en bloques

Conclusiones. Los resultados indican que la CB se ensambla por un mecanismo de bloques, evidenciado por la posición constante de C1 en la celulosa. El etanol podría mejorar la producción al optimizar el uso de glucosa, aunque esto no está del todo claro. La RMN de ^{13}C en estado sólido demuestra ser útil para estudiar cómo *K. xylinus* incorpora glucosa en la celulosa.

Agradecimientos. A la Secretaría de Ciencia, Humanidades, Tecnología e Innovación (SECIHTI) por la beca de doctorado otorgada a Curiel-Oлагue (número de beca: 841581).

Referencias.

1. Y. González-García, J. C. Meza-Contreras, J. A. Gutierrez-Ortega and R. Manríquez-González, *Polymers*, 2022, **14**, 4388.
2. J. C. Meza-Contreras, R. Manríquez-González, J. A. Gutierrez-Ortega and Y. González-García, *Carbohydr. Res.*, 2018, **461**, 51-59.
3. Y. Li, C. Tian, H. Tian, J. Zhang, X. He, W. Ping and H. Lei, *Appl. Microbiol. Biotechnol.*, 2012, **96**, 1479-1487.
4. R. Aparicio-Ruiz, J. Castro-Mondragón, M. Orozco-Andrade, M., *Appl. Microbiol. Biotechnol.* 2019, **103** (11), 4397-4410.
5. H. Li, J. Liao, *Microbial Cell Factories* 2013, **12** (1), 4.

POTENCIAL ANTIOXIDANTE DEL 3-METOXICATECOL OBTENIDO DEL HONGO MARINO *Daldinia eschscholtzii*

Rubén Antonio García-Zavaleta^{1,2}, Karla G. Olivo-Flores², Ángel Trigos², Manuel E. Medina²
Alan Couttolenc³, César Espinoza^{2*}

¹Doctorado en Micología Aplicada, Centro de Investigación en Micología Aplicada, Universidad Veracruzana, 91010, Xalapa-Enríquez, Veracruz, México. ²Centro de Investigación en Micología Aplicada, Universidad Veracruzana, 91010, Xalapa-Enríquez, Veracruz, México. ³Facultad de Química Farmacéutica Biológica, Universidad Veracruzana, 91000, Xalapa-Enríquez, Veracruz, México.

*Correspondencia: César Espinoza, E-mail: cespinoza@uv.mx

Palabras clave: Antioxidantes, Hongos Marinos, Cultivo sumergido

Introducción. El estrés oxidativo, es un proceso fisiopatológico asociado a un desequilibrio en la homeostasis de los radicales libres; que han sido implicados en la etiología de distintas enfermedades. Los antioxidantes juegan un papel clave para evitar el daño que esta condición pueda causar (1). En la exploración de nuevas fuentes de metabolitos con capacidad antioxidante, se ha dirigido la atención hacia los ecosistemas marinos (2). Debido a esto, los hongos marinos representan un recurso biotecnológico con gran potencial para el aislamiento y caracterización de compuestos antioxidantes, mediante técnicas de cultivo sumergido.

Objetivo. Aislar y caracterizar metabolitos con actividad antioxidante obtenidos del cultivo sumergido del hongo marino *Daldinia eschscholtzii* asociado a corales.

Metodología. Los corales pétreos fueron recolectados del complejo arrecifal norte del PNSAV, Veracruz. Los corales fueron fragmentados y desinfestados para su inoculación en placas de Petri con agar PDA a 23 ± 2 °C. Tras el desarrollo micelial los hongos fueron purificados e identificados. Así, *D. eschscholtzii* se propagó en cultivo sumergido en medio PDA con 50% de agua de mar. Al finalizar, la biomasa fue extraída con CH_3OH , el extracto resultante fue sometido a una segunda extracción con CHCl_3 . El extracto con mayor capacidad antioxidante fue fraccionado por cromatografía en columna (3). Posteriormente, se evaluó la capacidad de las fracciones para estabilizar radicales libres (Galvinoxilo y ABTS⁺) y la reducción de metales (FRAP) (4). Finalmente, los metabolitos responsables de la bioactividad se elucidaron por medio de RMN de ^1H , ^{13}C , HSQC y HMBC.

Resultados y discusión. A partir del coral *Siderastrea siderea* se logró aislar el hongo marino *D. eschscholtzii*. El extracto clorofórmico de la biomasa fue el que presentó la mayor capacidad antioxidante ($380.0 \pm 8.4 \mu\text{M}$ Trolox /mg extracto) para estabilizar el radical ABTS⁺ y para el ensayo de FRAP ($232.49 \pm 16.22 \mu\text{M}$ Fe^{2+} /mg extracto). De dicho extracto, se obtuvieron 17 fracciones, donde la fracción (Pr 6-9) tuvo un (81% TEAC) para estabilizar el radical ABTS⁺ y ($504.70 \pm 17.43 \mu\text{M}$ Fe^{2+} /mg de extracto) para FRAP. Del seguimiento de la purificación bio-guiada, resultaron las fracciones de (63-83), en las que se observaron cristales color blanco, p.f. de 42-44 °C. RMN ^1H (500 MHz, CDCl_3) δ (ppm) 7.39 (dd, $J= 1.5$ Hz, 1H), 7.36 (dd, $J= 7.4$ Hz, 1H), 6.85 (dd, $J= 1.5$ Hz, 1H), 3.98 (s, 3H).

RMN ^{13}C (100 MHz, CDCl_3) δ (ppm) 157.24, 137.39, 126.5, 121.0, 117.5, 106.35, 56.6. Aunado a esto, en el análisis de HMBC se observó la correlación del grupo metoxi en posición orto al OH-2, además, C-3 con (H-5, H-4, H-7). Así también, del espectro HSQC se confirma la correlación de los carbonos aromáticos con sus respectivos protones confirmado así, un derivado aromático trisustituido (5), ver Figura 1.

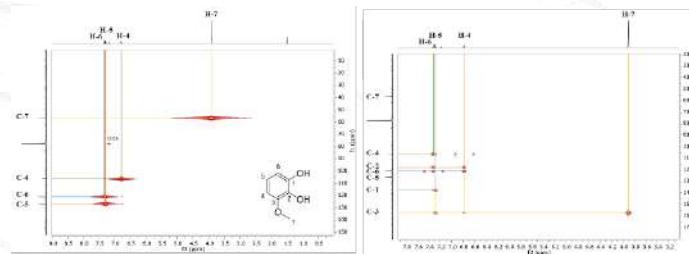


Figura 1. Del lado izquierdo se observa el espectro de HSQC y a la derecha el HMBC del 3-metoxicatecol.

Conclusiones. Se caracterizó 3-metoxicatecol con potencial antioxidante a partir de la purificación bio-guiada del cultivo sumergido de *D. eschscholtzii*. Lo anterior, demuestra el potencial antioxidante de los hongos asociados a corales, razón por la cual es importante promover el cuidado y respeto de los sistemas arrecifales de coral por su valor ecológico y farmacológico.

Agradecimientos. Al proyecto SIREI-UV (31506202571), SECIHTI (CBF-2025-1-1519), al cuerpo académico UV-CA-354 Química y Biotecnología de Hongos y la beca doctoral No. 840408.

Referencias.

1. I. Gulcin, *Arch Toxicol*, 2020, **94**, 651–715.
2. A. Couttolenc, M. E. Medina, Á. Trigos and C. Espinoza, *Electron J Biotechnol*, 2022, **55**, 40–46.
3. K. G. Olivo-Flores, A. Couttolenc, J. Suárez-Medellín, Á. Trigos and C. Espinoza, *Electron J Biotechnol*, 2024, **72**, 12–19.
4. C. Ricaño-Rodríguez, I. Lagunes, M. E. Medina, A. Couttolenc, R. Medel-Ortiz and C. Espinoza, *Tropical and Subtropical Agroecosystems*, DOI:10.56369/taesa.5800.
5. A. Y. Loo, K. Jain and I. Darah, *Food Chem*, 2008, **107**, 1151–1160.

ANÁLISIS DE LAS INTERACCIONES MOLECULARES ENTRE D-GLUCOSAMINA Y N-ACETIL-GLUCOSAMINA CON CURCUMINA Y ÉSTER FENETÍLICO DEL ÁCIDO CAFEICO EN DMSO MEDIANTE ESPECTROSCOPIA DE RMN DE ^1H

Evelin Martínez Benavidez, Ana Lilia Sánchez García, Zaira Domínguez, Magali Salas-Reyes, Gustavo Adolfo Castillo Herrera, Inocencio Higuera Ciapara, Ofelia Yadira Lugo Melchor, Motomichi Inoue Noguchi y Claudia Isabel Virués Colorado*

* Instituto de Química Aplicada, Universidad Veracruzana, Dr. Luis Castelazo Ayala s/n, Col. Industrial las Animas, Xalapa, Veracruz, 91190. Teléfono 2288418917. Mail: cvirues@uv.mx.

Palabras clave: *Quitosano, Curcumina, RMN*

Introducción: El quitosano (CS), es un biopolímero utilizado en sistemas de liberación de fármacos poco solubles en agua, gracias a su capacidad para formar nanopartículas (1,2). La curcumina (CUR), un compuesto natural con efectos terapéuticos es hidrofóbica, lo que limita su aplicación. Comprender las interacciones moleculares entre CUR y los monómeros del CS —D-glucosamina (Gn) y N-acetilglucosamina (AGn)— es clave para optimizar el diseño de estos sistemas de liberación (3,4,5). Para lograrlo, aquí se usó primeramente como modelo simplificado, el éster fenetílico del ácido cafeico (CAPE), estructuralmente similar a la CUR(6).

Objetivo: Identificar los sitios de unión y fuerza de interacción de Gn y AGn con CAPE y CUR.

Metodología. Los compuestos se secaron al alto vacío durante 2 horas a temperatura ambiente. Los análisis de RMN de ^1H se realizaron en DMSO-d₆ a 25 °C con un espectrómetro de 500 MHz, usando como referencia la señal del DMSO-d₆ ($\delta = 2.50$ ppm).

Resultados y discusión: La glucosamina catiónica (GnH⁺) forma complejos con CAPE (Figura 1) y Curcumina (Figura 2) mediante enlaces de hidrógeno en sus grupos fenólicos, causando cambios característicos en los espectros de RMN. El grupo amino protonado (NH₃⁺) de la glucosamina es esencial para esta interacción. La N-acetilglucosamina no muestra interacción significativa.

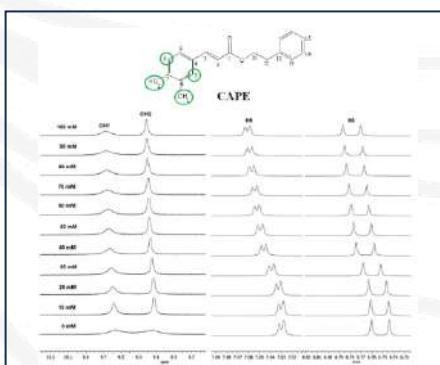


Figura 1. Señales del grupo catecol de CAPE (10 mM) en presencia de (GnH⁺) a diferentes concentraciones (0-100 mM) en DMSO-d₆

La glucosamina en solución tiende a agruparse formando agregados mediante enlaces débiles (5). En el modelo

11^a Reunión de Resonancia Magnética Nuclear Experimental, Instituto de Ciencias Básicas, Universidad Veracruzana, Xalapa, 28 y 29 de agosto de 2025

propuesto, el agregado predominante es el que reacciona con la molécula fenólica (CAPE o CUR) para formar los complejos. Los datos indican que el número de moléculas de glucosamina en el agregado es igual a 3 o 4 según las condiciones del solvente, especialmente su humedad.

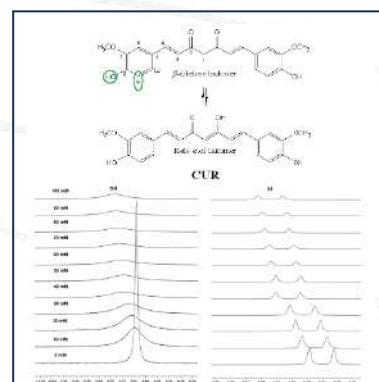


Figura 2. Señales del grupo guaiacol de CUR (10 mM) en presencia de (GnH⁺) a diferentes concentraciones (0-100 mM) en DMSO-d₆

Conclusiones: El análisis de RMN de ^1H en DMSO revela que el catión de glucosamina (GnH⁺) forma complejos 1:1 con CAPE y curcumina a través de agregados de tres o cuatro unidades, estabilizados por uniones múltiples débiles, mientras que la N-acetilglucosamina no participa. La estequiometría varía según la humedad del disolvente y sugiere que segmentos de glucosamina pueden atrapar moléculas fenólicas, posiblemente también en medios acuosos.

Referencias.

1. A. Harugade, A.P. Sherje, A. Pethe, *React. Funct. Polym.* 2022, **191**, 105634.
2. N. Desai, D. Rana, S. Salave, R. Gupta, P. Patel, B. Karunakaran, A. Sharma, J. Giri, D. Benival, N. Kommineni, *Pharmaceutics*, **15**, 2023, 1313.
3. Q. Hu, Y. Luo, *Int. J. Biol. Mol.* **179**, 2021, 125-135.
4. Y. Hussain, W. Alam, H. Ullah, M. Dacrema, M. Daglia, H. Khan, C.R. Arciola, *Antibiotics (Basel)*, **11**, 2022, 322.
5. I. Higuera-Ciapara, C. Virués, M. Jiménez-Chávez, E. Martínez-Benavidez, J. Hernández, Z. Domínguez, R. López-Rendón, E.F. Velázquez, M. Inoue, *Carbohydr. Res.* 2017, **452**, 6-16.
6. F. Armutcu, S. Akyol, S. Ustunsoy, F.F. Turan, *Exp. Ther. Med.* 2015, **9**, 1582-1588.

NUEVO MÉTODO DE SÍNTESIS Y ASIGNACIÓN INEQUÍVOCA DE LA ESTRUCTURA DE INDOLES 3-ALQUIL-SUSTITUIDOS MEDIANTE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR EN 2D

Priscila Janeth Ramírez Gracia, Gabriela A. Sosa Ortiz, Ricardo Tovar Miranda, Tomás Guerrero*, Universidad Veracruzana, Instituto de Ciencias Básicas, Dr. Luis Castelazo Ayala s/n, Col. Industrial Ánimas, Xalapa, Ver. 91190, México. E-mail: priscila_janeth@live.com.mx, tguerrero@uv.mx.

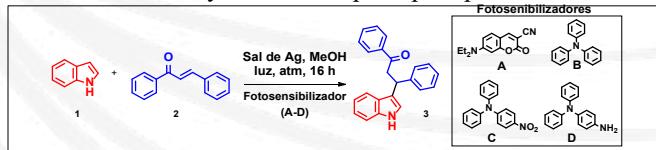
Palabras clave: Fotocatálisis, Alquilación de Friedel-Crafts, RMN-2D.

Introducción. La alquilación de Friedel-Crafts del indol es una reacción clásica para obtener derivados con potencial farmacológico, aunque las metodologías tradicionales requieren grupos protectores y condiciones extremas. La fotocatálisis ofrece una alternativa eficiente en condiciones suaves, y se han empleado fotosensibilizadores como rosa de Bengala, complejos de $[\text{Ru}(\text{bpy})]^{+}$ y 9,10-fenantrenodiona con diversos electrófilos, aunque aún con limitaciones.

En este trabajo se presenta una estrategia fotocatalítica para la alquilación en C-3 de indoles, sin grupos protectores, empleando un derivado de trifenilamina como fotosensibilizador. La RMN 2D fue clave para la asignación estructural inequívoca, superando las limitaciones de la RMN 1D en casos con señales solapadas o posibles isómeros.

Objetivo. Realizar la síntesis de indoles 3-alquilsustituidos mediante una reacción de Friedel-Crafts promovida por luz y realizar su asignación estructural mediante espectroscopía de RMN bidimensional (2D).

Metodología. La reacción modelo entre 1*H*-indol y difenilchalcona (Esquema 1) se evaluó en diferentes condiciones; irradiación con luz LED blanca y UV, empleando distintos disolventes y ácidos de Lewis. Una vez evaluando las mejores condiciones se realizaron experimentos de control para asegurar que la reacción requiere del fotosensibilizador y de la sal de plata para proceder.



Esquema 1. Reacción general y moléculas evaluadas como fotosensibilizadores.

Resultados y discusión. El método se optimizó evaluando diferentes parámetros: tipo de fotosensibilizador, disolvente, contríon y carga de la sal de plata(I), así como tiempos de reacción y atmósfera. Bajo las condiciones óptimas se obtuvieron 12 dihidrochalconas (Figura 1) con rendimientos moderados. Además, se propuso un mecanismo que involucra la formación de radicales, respaldado por un experimento de inhibición con TEMPO y estudios DFT, que permitieron comprender el proceso fotoinducido.

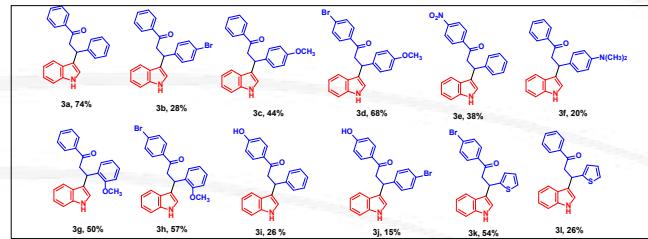


Figura 1. Dihidrochalconas sintetizadas con el método desarrollado.

Los productos obtenidos se elucidaron mediante espectroscopía de RMN 1D (^1H y ^{13}C) y 2D (COSY, HSQC, HMBC) (Figura 2), se muestra como ejemplo el espectro de ^1H y el correspondiente mapa de correlaciones COSY.

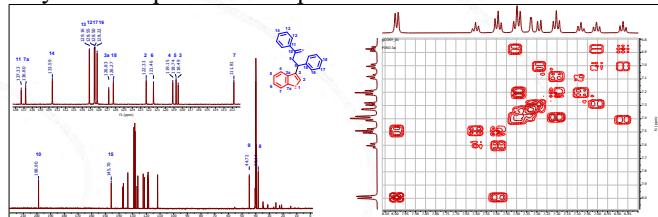


Figura 2. Espectro de RMN de ^1H y COSY de la 3-(^1H -indol-3-il)-1,3-difenilpropan-1-ona (500 MHz, DMSO-d_6).

Conclusiones. Se desarrolló un método fotocatalítico eficiente para sintetizar indoles 3-alquilsustituidos bajo irradiación UV, sin necesidad de grupos protectores y en condiciones suaves. La RMN 2D fue clave para confirmar la posición del sustituyente y realizar la asignación inequívoca de las señales. Además, se obtuvieron cuatro compuestos no reportados previamente en la literatura.

Agradecimientos.

A SECIHTI por las becas correspondientes: PJRG (1314633) y GASO (Postdoctorado). A O. García-Barradas y G. A. Vásquez-Reyes por la RMN de 1D y 2D. Al Laboratorio Nacional de Supercómputo del Sureste de México, Secihti

Referencias.

1. G. Goti, K. Manal, J. Sivaguru, L. Dell'Amico, *Nat. Chem.*, 2024, **16**, 684–692.
2. T. Guerrero, F. Vázquez-Ortega, I. Lagunes, Á. Trigos, *Dyes Pigments*, 2021, **192**, 109447.

ACTIVIDAD BIOLÓGICA DE TERPENOS DE *Tilia americana* EN UN MODELO DE PARKINSON INDUCIDO CON RESERPINA

Maribel Osorio-García^{a,b}, Antonio Rupert Jiménez Aparicio^b, Maribel Herrera-Ruiz^a, Alejandro Zamilpa Alvarez^a, Manasés González-Cortázar^{a*}

^aCentro de Investigación Biomédica del Sur, IMSS. ^bCentro de Desarrollo de Productos Bióticos, IPN.

Dirección de correspondencia: Argentina No. 1, Col. Centro, Xochitepec, Morelos 62790, México.

Tel. 7351651592 Correo: maribel.osorio@uaem.mx, gmanases2000@gmail.com

Palabras clave: Esteroles, conducta motora, neuroprotector

Introducción. La Enfermedad de Parkinson (EP) es un trastorno neurodegenerativo causado por la disminución de dopamina plasmática, que es regulada por las monoamino oxidasas (MAO) (1). Ocupa el segundo lugar de prevalencia mundial (con 8 millones de personas) dentro de los problemas neurológicos, tan sólo después del Alzheimer. Aunque el tratamiento actual es efectivo, todavía se requiere de la búsqueda de mejores terapias, las plantas son un blanco de estudio farmacológico en este intento. *Tilia americana* var. mexicana y sus metabolitos secundarios ejercen efecto ansiolítico, tranquilizante, anti convulsivante, analgésico y antidepresivo (2) Algunos de éstos son querceolina, rutina, isoquerceolina (flavonoides) y β-sitosterol (3).

Objetivo. Aislar y caracterizar compuestos del extracto metanólico (TaMeOH) de *Tilia americana* para determinar su actividad biológica en un modelo de Parkinson experimental inducido por reserpina

Metodología. Se obtuvo el TaMeOH (100 mg/kg/vía oral) de hojas secas de *T. americana*, que fue cromatográficamente separado, para obtener fracciones químicamente diferentes R1 y R7 (25 mg/kg, vía oral) cuyo contenido principal son R1: α y β-amirina, β-sitosterol y estigmasterol, ácido ursólico. Los compuestos aislados fueron caracterizados por RMN. Los espectros se obtuvieron en una sonda ultracoolprobe Agilent DD2-600 a 600 MHz para ¹H y 150 MHz para ¹³C, con CDCl₃. Se usó un modelo de EP en ratones por la administración de RES (1 mg/kg, ip, 4 días), los animales fueron sometidos a evaluación motora, coordinación motriz el día 6, 8, 15, 23 y un análisis cualitativo/observacional de diferentes variables en la prueba de Irwin.

Resultados y discusión.

Se analizó el contenido de terpenos de esta especie, que ha sido poco estudiado. Fueron caracterizados por RMN de ¹H y ¹³C. A través de esto fue posible determinar que α y β-amirina, se encontraban en mezcla, siendo técnica que permite determinarlo, en placa se presentan como una sola mancha con el mismo rf. La mezcla se determinó a través de las señales del C-13 (145.34, β amirina; 139.73, α amirina), y el C-12 (124.56, α amirina; 124.86 β amirina). Esto se corroboró en el espectro de ¹H, con la señal vinílica de H-12 (5.18 dd, J= 3.43, 3.5 Hz, β-amirina; 5.13, dd, J=3.6.3.8 Hz,

α amirina), la integral permitió determinar que se encuentran en una relación 12:1, siendo predominante la β-amirina. En la Fig. 1, se muestra la ampliación de las señales de ¹³C y ¹H de esta mezcla.

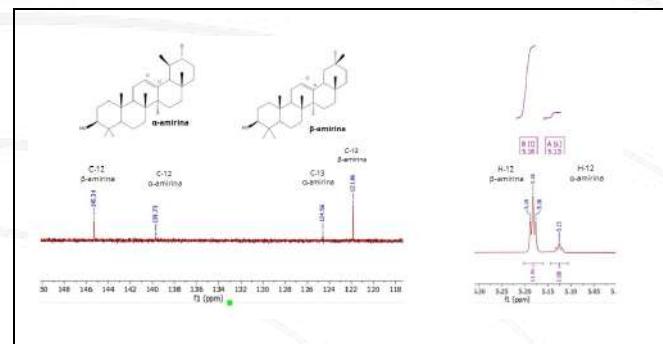


Figura 1. Mezcla de α amirina y β amirina determinadas por RMN ¹³C y ¹H.

TaMeOH, R1 mejora significativamente la conducta motora espontánea y la coordinación en comparación con el grupo de daño, siendo superior R1, cuyo contenido principal son terpenos. En la prueba de Irwin hubo variabilidad de respuesta, pero si fue notable la recuperación con respecto al grupo de daño. En comparación con el grupo L-DOPA, la recuperación de los animales fue mejor con TaMeOH.

Conclusiones.

Se ha estudiado poco el efecto de los terpenos en las actividades reportadas previamente en *T. americana*.

Se puede concluir que *T. americana* y sus compuestos son capaces de contrarrestar el daño-tipo Parkinson inducido con RES.

Agradecimientos. Se agradece a la Secretaría de Ciencia, Humanidades, Tecnología e Innovación (SECIHTI) por la beca 842510. Al CIBIS (R-2025-1702-002) y CEPROBI,

Referencias.

1. D. Charvin, R. Medori, R. Hauser, et al. *Nat Rev Drug Discov*, 2018, **1**, 804–822.
2. N. Rodríguez, ME. González-Trujano, et al., *Oxidative medicine and cellular longevity* 2014, **2014**, 329172.
3. GB. Martínez-Hernández, E Jiménez-Ferrer, et al. *Journal of Ethnopharmacology*, 2021, **267**, 113619.

DISEÑO, SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN POR RMN DE OXIMAS DERIVADAS DE HECOGENINA

Esmeralda Aquino Miguel,^{1*} Joel Luis Terán,² Maricruz Anaya Ruiz,³ Alan Carrasco Carballo.¹

¹Laboratorio de Elucidación y Síntesis en Química Orgánica, ICUAP, BUAP, Puebla, Puebla, México.

²Centro de Química, ICUAP, BUAP, Puebla, Puebla, México.

³CIBIOR, IMSS, Metepec, Puebla, México.

*Teléfono: 9511876678

*Correo: am224470281@alm.buap.mx

Palabras clave: *hecogenina, oxima, caracterización.*

Introducción.

La búsqueda de nuevos principios activos en la industria farmacéutica se centra en el estudio de productos naturales como materias primas, dentro de este amplio grupo se encuentran las sapogeninas, las cuales poseen diversas actividades biológicas. Un claro ejemplo es la hecogenina, molécula proveniente del género *Agaves* y *Tribulus terrestres L.*, ha dicha molécula se le ha atribuido propiedades antitumorales, antimicrobianas, gastroprotectoras, entre otras (1). La actividad biológica y las características fisicoquímicas se pueden modificar mediante la introducción de grupos de moléculas por modificación estructural (2). Un grupo de moléculas de relevancia biológica son las oximas, a quienes se les ha determinado actividad antimicrobiana, antioxidante, antiinflamatoria y anticancerígena (3), lo que vuelve de interés su incorporación selectiva a la hecogenina, volviendo fundamental su caracterización.

Objetivo.

Sintetizar y analizar, por resonancia magnética nuclear, oximas derivadas de hecogenina.

Metodología.

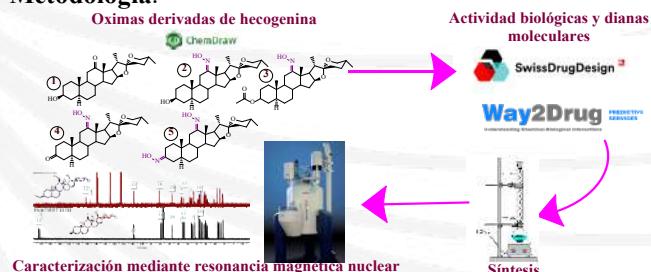


Figura 1. Metodología para la síntesis de oximas derivadas de la hecogenina.

Resultados y discusión.

Se sintetizaron 5 oximas a partir de la hecogenina y derivados acetilados u oxidados, donde con el análisis de similitud estructural destacan diversas actividades biológicas, tal es el caso de la actividad anticancerígena, nootrópica, antagonista del colesterol, inhibidor de la bilirrubina oxidasa, entre otros (figura 2).

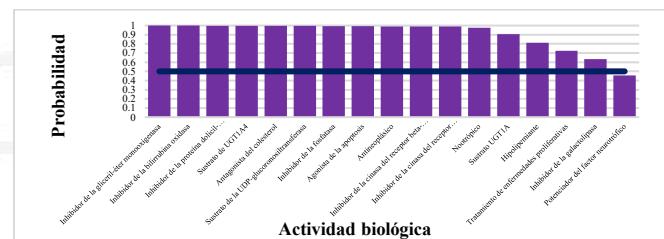


Figura 2. Diagrama de frecuencia acumulada de oximas derivadas de la hecogenina.

Dado el alto potencial encontrado se procedió a la síntesis de los mejores derivados, destacando a la dioxima en C-3 y C-12, que se puede comprobar mediante el análisis de los espectros de resonancia magnética nuclear de ¹³C a 125 MHz en el que se observan los desplazamientos de las señales del C-3 y C-12 en 211 y 213 ppm respectivamente a 157 y 162 ppm (Tabla 1).

Tabla 1. Desplazamientos químicos (ppm) en el espectro ¹³C RMN a 125 MHz de las oximas derivadas de hecogenina.

Molécula	C26	C22	C16	C12	C3
1	66.86	109.25	79.18	213.66	70.87
2	66.66	109.07	80.34	162.63	70.21
3	66.90	109.15	80.27	162.92	73.48
4	66.73	109.17	80.33	162.53	213.68
5	66.67	109.07	80.30	162.37	157.05

Conclusiones. Las oximas derivadas de hecogenina se obtienen mediante la reacción de condensación con hidroxilamina. La síntesis de estos compuestos se puede comprobar mediante la observación del desplazamiento de la señal del grupo ceto de 210 ppm a 160 ppm correspondiente a la señal del grupo oxima.

Referencias.

1. M. A. da H. Borges, F. R. S. Passos, J. de S. S. Quintans and F. J. Azeredo, *Biomed. Pharmacother.*, 2023, **159**, 114251.
2. H. Yao, J. Liu, S. Xu, Z. Zhu and J. Xu, *Expert Opin Drug Discov.*, 2017, **12**, 121-140.
3. J. Dhuguru, E. Zyagin and R. Skouta, *Pharmaceuticals*, 2022, **15**, 66.
4. J. Mas-Roselló and N. Cramer, *Chem. Eur. J.*, 2021, **28**.

IDENTIFICACIÓN Y PURIFICACIÓN DE COMPUESTOS FENÓLICOS DE *Tilia americana* VAR. *MEXICANA* CON POSIBLE EFECTO NEUROPROTECTOR.

Gerardo Yael Armas Acosta^c, Alejandro Zamilpa Alvarez^a, Manasés González-Cortázar^a, Maribel Osorio-García^{a,b*}

^aCentro de Investigación Biomédica del Centro de Investigación Biomédica del Sur, IMSS. ^bCentro de Desarrollo de Productos Bióticos, IPN. ^cFacultad de Farmacia, UAEM. Dirección de correspondencia: Argentina No. 1, Col. Centro, Xochitepec, Morelos 62790, México.

Tel. 7351651592 Correo: gerardo.armas@uaem.edu.mx, maribel.osorio@uaem.mx

Palabras clave: *Tilia, americana, compuestos fenólicos, RMN.*

Introducción.

Tilia americana var mexicana, es un árbol cuya infusión de hojas e inflorescencias se usa en la medicina tradicional de Europa y Latinoamérica como tranquilizante, anticonvulsionante y analgésico (1). Modelos experimentales han demostrado esos efectos, así como actividades antioxidantes y citotóxicas (2), los cuales son atribuidos a compuestos como flavonoides, cumarinas, ácidos fenólicos y polifenoles (3).

Objetivo. Purificar e identificar específicamente compuestos fenólicos de *Tilia americana* var. Mexicana para probarlos en un modelo de Parkinson experimental y determinar su efecto neuroprotector.

Metodología. El extracto metanólico TaMeOH de las hojas de *Tilia*, se disolvió en agua y se realizó bipartición con AcOEt. La fracción acuosa se sometió a una separación por columna cromatográfica de fase normal empleando las siguientes mezclas: AcOEt (100%), MeOH (100%), MeOH/H₂O (80:20) y MeOH/H₂O (50:50) con volúmenes de 200mL. La fracción Ta-AcOEt, fue sometida a una separación cromatográfica de fase normal con un sistema CH₂Cl₂ y MeOH. Los espectros (I-IV) se obtuvieron en una sonda ultracoolprobe Agilent DD2-600 a 600 MHz para ¹H y 150 MHz para ¹³C, con CDCl₃.

Resultados y discusión. Se aislaron 4 compuestos I) Escopoletina, II) Ácido cafeico, III) Ácido cumárico y IV) Ácido clorogénico que fueron identificados por HPLC y caracterizados por RMN de ¹H y ¹³C (Tabla 1).

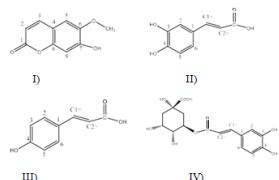


Figura 1. Estructuras químicas de compuestos aislados (1-IV) de TaAcOEt de *Tilia americana* var. mexicana.

Estos compuestos contienen las señales características del clásico esqueleto C6-C3 de los fenilpropanoides, en RMN de ¹³C los carbonos aromáticos están entre 110-160 ppm, el carbonilo entre 165-170 ppm y el doble enlace, cuyas señales aparecen entre 115-147 ppm. El ácido clorogénico presenta además señales de base de oxígeno. (Tabla 1)

Carbono	Escopoletina (ppm)	Ácido cafeico (ppm)	Ácido cumárico (ppm)	Ácido clorogénico (ppm)
C1 =	—	146.90	145.32	145.90
C2 =	—	115.10	115.50	115.20
COOH	—	169.75	168.58	169.90
C1	160.45	127.75	126.10	126.60
C2	111.55	115.10	130.44	114.10
C3	144.20	146.60	116.19	144.20
C4	110.45	149.25	160.01	147.00
C5	109.50	116.45	116.19	116.00
C6	145.20	122.75	130.44	122.60
C7	151.00	—	—	—
C8	102.65	—	—	—
C9	149.45	—	—	—
OC ₂ H ₅ (metoxi)	55.90	—	—	—

Tabla 1. Desplazamientos químicos δ (ppm) de RMN de ¹³C de los compuestos aislados (1-IV)

La Figura 2 muestra el espectro de ¹H del ácido cumárico, donde es posible visualizar dos señales dobles que corresponden al sistema AB del anillo aromático 87.42,d, 8.6 Hz y 6.78, d, 8.6 Hz y las dos señales dobles correspondientes a los H vinílicos en posición trans 87.55, d, 15.9 Hz y 6.27,d, 15.9 Hz.

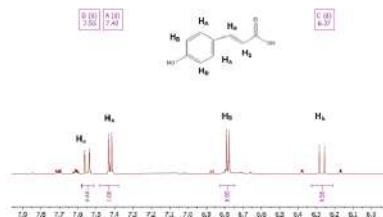


Figura 2. Espectro de RMN de ¹H del ácido cumárico III)

El extracto metanólico TaMeOH se probó en un modelo de parkinson experimental y se demostró que mejora la conducta motora espontánea, la coordinación y recuperación de los animales, la fracción Ta-AcOEt y estos compuestos se probarán en ese modelo.

Conclusiones. A través de las técnicas de RMN fue posible caracterizar los compuestos I-IV, con posible efecto neuroprotectores.

Agradecimientos. Al CIBIS (R-2025-1702-002) y la UAEM para la realización de este proyecto.

Referencias.

- 1) E. Coballase-Urrutia , et al, Iran J Pharm Res.2022;21(1)126914.https://doi.org/10.5812/ijpr-126914.
- 2) N. Rodríguez, ME. González-Trujano, et al., *Oxidative medicine and cellular longevity* 2014, 2014, 329172.
- 3) Jhoana, F. S. K. 2020, UAM. <https://bindani.itz.uam.mx/concern/tesiuams/b8515n5>

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE CONJUGADOS ETINILESTRADIOL-GLUCOSA

Ma. Eugenia Ochoa, Rosa Santillan*

Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del Instituto Politécnico Nacional, Departamento de Química

Av. Instituto Politécnico Nacional 2508, 07360, Ciudad de México, México

Email: mochoa70@hotmail.com, rsantill@cinvestav.mx, tel 5557473800 ext 4420.

Palabras clave: Esteroides, Azúcares, reacción click

Introducción. Los derivados esteroidales ya sea naturales o sintéticos juegan un papel muy importante en el tratamiento de neoplasias malignas.¹ Por otro lado, se han sintetizado novedosos fármacos con triazoles y grupos esteroidales, observándose que presentan efecto contra el cáncer en células.^{2,3} Por lo anterior, en este trabajo presentamos la síntesis de nuevos compuestos 1,2,3-triazoles-1,4-disustituidos a partir de la combinación de una de glucosa y etinilestradiol.

Objetivo. Sintetizar y caracterizar el 1,2,3-triazol derivado de la reacción entre el conjugado etinilestradiol-glucosa **1** y el producto de hidrólisis **2**, como potenciales agentes anticancerígenos

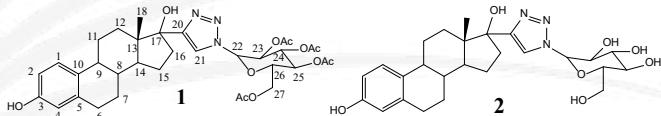


Figura 1. Conjugados esteroide-azúcar sintetizados

Metodología. La azida β -D-glucopiranósil se obtuvo por acetilación de los grupos hidroxilo de la glucosa con $\text{Ac}_2\text{O}/\text{Py}$, posterior bromación con HBr/AcOH en la posición anomérica para obtener la azida con NaN_3/Py .⁴ El compuesto **1**² se obtuvo mediante una reacción click empleando 1 mmol de la azida β -D-glucopiranósil, 1.1 mmol del etinilestradiol, 0.25 mmol de CuI y 0.2 mmol de ascorbato de sodio en una solución de THF/agua (20 mL, 3:1) a 50°C bajo agitación durante 16 hr. El producto se purificó por cromatografía en sílica gel empleando acetato de etilo.

La hidrólisis de **1** se realizó empleando KOH disuelto en la mínima cantidad de agua y metanol, por agitación durante 30 min. El producto se purificó por columna en sílica gel empleando acetato de etilo/metanol (8:2).⁵

Resultados y discusión. El glico-conjugado **1** se obtuvo en un 91.0 % y el **2** en un 86%. Los derivados **1** y **2** fueron caracterizados por RMN (^1H , ^{13}C , y 2D), IR y espectrometría de masas las cuales muestran el ion molecular correspondiente a **1** en 670.3 y a **2** en 502.2.

En el espectro de RMN de ^1H de los compuestos **1** y **2** se observa la señal de 8.07 y 7.96 ppm, característica del CH del anillo del 1,2,3-triazol; en 7.00 una señal doble ($J = 8.4$ Hz, H-1), en 6.52 una señal dd ($J = 8.4$ y 2.7 Hz, H-2) y en 6.48 una señal doble ($J = 2.7$ Hz, H-4) para el anillo A del

esteroides. En el caso de **1** también se observan y las 4 señales de los acetatos del azúcar en 2.07, 2.05, 2.02 y 1.83 ppm, las cuales desaparecen después de realizar la hidrólisis (Figura 2)

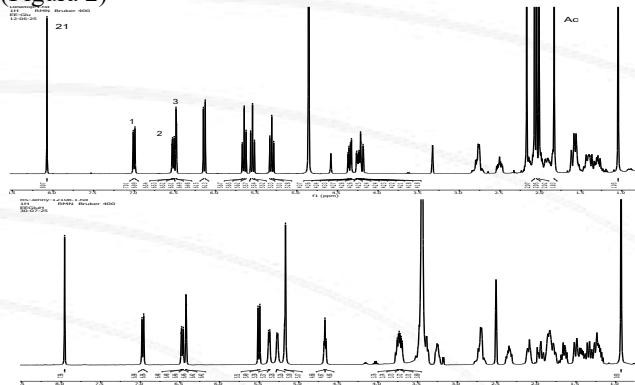


Figura 2. RMN de ^1H de los compuestos **1** en Metanol-d₄ y **2** en DMSO-d₆.

Conclusiones. La reacción click de etinilestradiol con la azida derivada de glucosa condujo al compuesto **1** en alto rendimiento, el cual fue posteriormente hidrolizado para favorecer su solubilidad en agua. Los dos compuestos fueron caracterizados por métodos espectroscópicos. La RMN de ^1H resulta de gran utilidad para confirmar la formación del anillo de 1,2,3-triazol por la señal de alrededor de 8.07 ppm correspondiente al CH triazólico.

Agradecimientos. Cinvestav.

Referencias.

1. J. A. R. Salvador, J. F. S. Carvalho, M. A. C. Neves, S. M. Silvestre, A. J. Leitao, M. M. C. Silva, M. L. Sá e Melo, *Nat. Prod. Rep.*, 2013, **30**, 324-374.
2. M. Ramadan, E. S. Aly, H. A. Saad, S. H. Abdel-Hafez, *Beilstein J. Org. Chem.* 2015, **11**, 1922–1932.
3. V. Ferro, L. Liu, K. D. Johnstone, N. Wimmer, T. Karoli, P. Handley, J. Rowley, K. Dredge, C. Ping Li, E. Hammond, K. Davis, L. Sarimaa, J. Harenberg, I. Bytheway, *J. Med. Chem.* 2012, **55**, 3804–3813
4. A. K. Agrahari, M. K. Jaiswal, M. S. Yadav, V. K. Tiwari, *Carbohydr. Res.*, 2021, **508**, 108403.
5. B. Ren, M. Wang, J. Liu, J. Ge, X. Zhang and H. Dong, *Green Chem.*, 2015, **17**, 1390–1394.

SULFAMATO DE RESERPINIO, UNA NUEVA FORMA SALINA DEL PRINCIPIO ACTIVO.

Daniel Alejandro Montes de Oca Maravilla^{1,2}, Diego Martínez Otero*², ¹Univer Milenium,

²CCIQS UAEMex UNAM, Campus UAEMéx “El Rosedal” Km 14.5 Carretera Toluca-Atlacomulco San Cayetano-Toluca, C.P. 50200, Estado de México., 722 276 6610,
dmartinez@iquimica.unam.mx.

Palabras clave: sulfamato, reserpino, RMN bidimensional(HSQC).

Introducción. Reserpina es un alcaloide indólico natural, extraído originalmente de la planta *Rauwolfia serpentina*, empleado de forma farmacológica para tratamientos hipertensivos y como sedante. La técnica formación de sales con diferentes aniones ha sido utilizada dentro del linaje farmacéutico con el fin de obtener compuestos con diferentes propiedades fisicoquímicas y eventualmente, buscando obtener nuevos principios activos con mejores propiedades que los existentes, optimizando la formulación de nuevos fármacos, mejorando eficiencia y seguridad. En la actualidad, ha predominado una baja en cuanto al uso de reserpina como tratamiento, debido a reacciones adversas. Es así como, se busca obtener nuevas sales de reserpina favorables que sean claves en el sector farmacéutico.

Objetivo. Obtener sales de reserpina con diferentes aniones para evaluar su solubilidad y biodisponibilidad.

Metodología. Soluciones de reserpina en diclorometano y ácido sulfámico en agua se hicieron reaccionar en relación molar 1:1 promovidos por calor con agitación. Después de 10 minutos de agitación constante se observa la formación de un precipitado blanco el cual fue filtrado, obteniendo el producto con un rendimiento de 88%.

Resultados y discusión. El producto aislado fue analizado inicialmente a través de RMN en experimentos de ¹H, ¹³C, sin embargo, debido a que la mayoría de las señales en el espectro de ¹H se encuentran traslapadas y no fue posible identificar su multiplicidad y constantes de acoplamiento y que las señales en el espectro de ¹³C se encontraban muy cercanas entre sí, fue necesario obtener espectros DEPT y HSQC (Figura 1) para poder realizar una asignación inequívoca. Se obtuvieron adicionalmente los espectros de infrarrojo, donde se observan diferentes señales de absorción distintivas en la región de 3400-3200 cm⁻¹ y 3000-2800 cm⁻¹, evidenciando desplazamientos de las bandas, a consecuencia de nuevas interacciones, también fue posible obtener cristales adecuados para difracción de rayos de rayos X de monocrystal, lo que permitió obtener la estructura de la sal de sulfamato de reserpino, permitiendo observar la formación del intercambio aniónico, así como el acomodo cristalino que rige a toda la molécula (Figura 2).

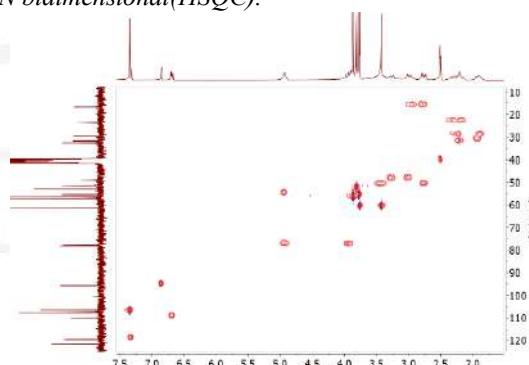


Figura 1. Espectro HSQC de sulfamato de reserpino en DMSO-*d*6

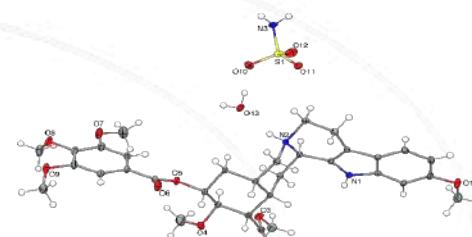


Figura 2. Diagrama ORTEP al 50% de probabilidad de sulfamato de reserpino.

Conclusiones. El empleo de las técnicas analíticas permitió evidenciar con gran precisión la identidad de una nueva sal de reserpina a través de una reacción ácido-base aperturando la variabilidad farmacológica, hecho que además abre posibilidades para desarrollar nuevas formas farmacéuticas.

Agradecimientos. A la M. en C. Lizbeth Triana C. por su apoyo en la realización de los análisis de espectrometría de infrarrojo, M. en C. María de las Nieves Zavala S. quien colaboró proporcionando los análisis de RMN y para el Dr. Uvaldo Hernández B. por la obtención de difractogramas de rayos X de polvos.

Referencias.

Pérez, J. *Difracción de Rayos X*. Universidad Politécnica de Cartagena. Dpto. Ingeniería Minera, Geológica y Cartográfica
R. H. Perry. *Manual del Ingeniero Químico*. 6^a Edn. McGraw-Hill, México, 1992.

R. Prohens y C. Puigjaner. *Polimorfismo en la industria farmacéutica*. 2007, pp. 58-68.

DETERMINACIÓN DE LA CONFIGURACIÓN ABSOLUTA DE NUEVOS COMPUESTOS AISLADOS DE *ROLDANA SESSILIFOLIA* CON POTENCIAL ACTIVIDAD CITOTÓXICA Y ANTIBACTERIANA.

Hector Viel, Federico del Rio*, Instituto de Química UNAM, Circuito Exterior S/N Ciudad Universitaria 04510, +52 5538072690, hviel93@gmail.com, federico.delrio@gmail.com.

Palabras claves: configuración absoluta, productos naturales, resonancia magnética nuclear

Introducción. Las plantas pueden proporcionar una amplia gama de compuestos complejos y estructuralmente diversos. Estos compuestos constituyen una fuente de nuevas moléculas para fármacos en la actualidad. Debido a la resistencia antimicrobiana, así como la necesidad de nuevos fármacos efectivos y menos tóxicos en la prevención y tratamiento del cáncer, se requiere el estudio de nuevos compuestos con potencial actividad antimicrobiana y citotóxica, para bacterias multirresistentes y líneas celulares carcinogénicas. *Roldana Sessilifolia* es una especie endémica de México con múltiples usos en la medicina tradicional. La Resonancia Magnética Nuclear (RMN) es una técnica ampliamente utilizada en la elucidación estructural. Los métodos computacionales de Teoría de Densidad Funcional (DFT) en combinación con la RMN han resultado ser una poderosa herramienta para la determinación de la configuración absoluta de nuevos productos naturales.

Objetivo. La determinación de la configuración absoluta de nuevos compuestos con potencial actividad antimicrobiana y citotóxica.

Metodología. Los desplazamientos químicos, las integrales, la multiplicidad y las *J* asociadas a los diferentes entornos químicos de RMN ¹H se obtuvieron de cada compuesto. Posteriormente a través de experimentos de HSQC-editado, se establecen las correlaciones heteronucleares a un enlace. La conectividad en la molécula se determina de las correlaciones heteronucleares a dos y tres enlaces. Luego se determina la configuración relativa y absoluta a través de las correlaciones espaciales usando NOESY. A cada confórmero resultante de cada configuración absoluta se le calculan las constantes de blindaje o apantallamiento teóricas RMN ¹H, así como las constantes de acoplamiento *J*. Los valores anteriores se computarizan en QUIMERAX y se comparan con los espectros de RMN ¹H experimentales.

Resultados y discusión. Se obtuvo el 2,6-dihydroxy-3-(hydroxymethyl)-2,5-dimethyl-3,4-dihydronephthalen-1(2H)-one, a partir de la observación de un patrón de disustitución en -orto de aromático, y señales alifáticas características. El estereoisómero correcto se obtuvo del análisis de los experimentos NOESY en combinación con los experimentos DFT en ORCA 6.0.

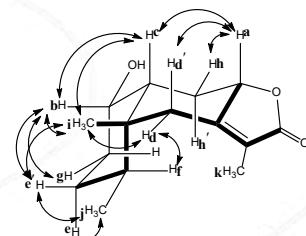
Se obtuvo el 6-hydroxy-5-methyl-2-(prop-1-en-2-yl)-3,4-dihydronephthalen-1(2H)-one, debido que se observó el

mismo patrón de disustitución aromática anterior, señales alifáticas y vinílicas características. El estereoisómero correcto se obtuvo muy parecido al caso anterior.

(4aR,5S,8S,8aR,9aS)-8-hydroxy-3,4a,5-trimethyl-4a,5,6,7,8,8a,9,9a-octahydronaphtho[2,3-b]furan-2(4H)-one fue obtenido a partir de la observación de un patrón característico de gamma-lactona α,β insaturada de eremofilanos, así como las señales alifáticas de los grupos -CH₂ diasterotópicos. La disposición espacial característica de los ciclohexanos fusionados a través del análisis de *J*s (Tabla 1), y las correlaciones espaciales por efecto NOE (Figura 1) permitió definir la configuración absoluta.

δ ¹ H/ ppm	Mult.	<i>J</i> (Hz)	Asig.	Interacción
4.74	dd	7.4; 10.8	a	Ax:Ec/Ax
4.07	dt	4.8; 11.9	b	Ax:Ec/Ax
1.91	dt	4.1; 13.3	c	Ax:Ec/Ax

Tabla 1. Interacciones a tres enlaces: Axial(Ax):Axial y Axial:Ecuatorial(Ec) de los hidrógenos a, b y c.



Premiación

PREMIACIÓN

Modalidad: Presentación *Flash*

Nivel Licenciatura

Primer lugar	<p>SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE TRIPTOFANOATOS DE ALQUILO</p> <p>Roberto A. Galeana-Ascencio¹, Ramsés E. Ramírez Gutiérrez², Sandra Raquel Reyez-Carmona³, Alberto Ramírez Mata³, Alan Carrasco-Carballo¹</p> <p>¹Laboratorio de Elucidación y Síntesis en Química Orgánica, CQ, ICUAP, BUAP, Puebla, México.</p> <p>²Facultad de Ciencias Químicas, BUAP, Puebla, México.</p> <p>³Laboratorio de Interacción bacteria-planta, Centro de Investigaciones en Ciencias Microbiológicas, ICUAP, BUAP, Puebla, México.</p>
Segundo lugar	<p>SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE BROMUROS DE PIRIDINIO DERIVADOS DEL ACETATO DE COLESTEROL</p> <p>José María Peña Martínez^{1*}, Marta Elena Hernandez-Caballero², Joel L. Terán³, Alan Carrasco Carballo¹</p> <p>¹Laboratorio de Elucidación y Síntesis en Química Orgánica, Instituto de Ciencias, BUAP, México</p> <p>²Biomedicina, Facultad de Medicina, BUAP, Puebla 72570</p> <p>³Centro de Química, Instituto de Ciencias, BUAP, Puebla 72570.</p>
Tercer lugar	<p>ANÁLISIS ESPECTROSCÓPICO PARA LA CARACTERIZACIÓN DE LA RUTA DE SÍNTESIS DE LA ALLOPREGNANOLONA 17-HIDRAZINIL-2-OXOETILO PIRIDINA-1-ION BROMURO MEDIANTE RMN E IR</p> <p>J. Luis Sánchez-Juárez¹, Hisami Rodríguez-Matsui¹, Joel L. Teran², Alan Carrasco Carballo¹</p> <p>¹Laboratorio de Elucidación y Síntesis en Química Orgánica, ICUAP, BUAP, Puebla México</p>

PREMIACIÓN

Modalidad: Presentación *Flash*

Nivel Maestría

Primer lugar	<p>DESARROLLO DE UN MÉTODO DE RMN PARA LA CUANTIFICACIÓN DE OCHRACEÓLIDA A</p> <p>Nataly Arias-López, Jimmy Ceballos-Cruz, Gumersindo Mirón-López, Gonzalo Mena-Rejón*. Laboratorio de Química Farmacéutica, Facultad de Química, UADY. Calle 43 s/n x 96 Paseo de las fuentes y 40 Col. Inalámbrica, Mérida, Yucatán, México.</p>
Segundo lugar	<p>RTA SINTÉTICA PARA LA OBTENCIÓN DE BIOCONJUGADOS DE HIDROXIBENZOATOS DE HECOGENILO</p> <p>Juan Alex Hernández Rivera^{1*}, Sandra Raquel Reyes Carmona², Alan Carrasco Carballo¹ ¹Laboratorio de Elucidación y Síntesis en Química Orgánica, CQ, ICUAP, BUAP, Puebla, México ²Laboratorio de Interacción Bacteria-Planta, CICM, ICUAP, BUAP, Puebla 72570, México</p>
Tercer lugar	<p>BIOCONJUGADOS DERIVADOS DE HECOGENINA CON SALES DE PIRIDINIO MONO, DI Y TRI METIL-SUSTITUIDAS: SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN</p> <p>Edwin Lara Cruz¹, Joel L. Terán², Maricruz Anaya Ruiz³, Alan Carrasco Carballo¹, ¹Laboratorio de Elucidación y Síntesis en Química Orgánica, CQ, ICUAP, BUAP, Puebla, México ²Centro de Química, Instituto de Ciencias, BUAP, 74360 Atlixco, Pue. ³Centro de Investigación Biomédica de Oriente (CIBIOR, IMSS)</p>

PREMIACIÓN

Modalidad: Presentación *Flash*

Nivel Doctorado

Primer lugar	<p>AISLAMIENTO Y CARACTERIZACIÓN DE PSILOCYBINA EN <i>PSILOCYBE CUBENSIS</i> DEL ESTADO DE HIDALGO: AVANCES EN LA INVESTIGACIÓN</p> <p>Aylín Rocío Tabal Robles^{1*}, Leticia Romero Bautista², Susana Rojas Lima¹, María Eva González Trujano³, Laura Guzmán Dávalos⁴, J. Martín Torres Valencia¹. ¹Área Académica de Química; ²Área Académica de Biología. Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, Mineral de la Reforma, 42184, Hidalgo. ³Laboratorio de Neurofarmacología de Productos Naturales, Instituto Nacional de Psiquiatría Ramón de la Fuente Muñiz, Tlalpan, CDMX. ⁴Departamento de Botánica y Zoología, Universidad de Guadalajara, Zapopan, Jalisco</p>
Segundo lugar	<p>EFFECTO REGENERATIVO DE ASTAXANTINA NANOEMULSIFICADA: PERFIL METABOLÓMICO POR RMN ¹H EN UN MODELO MURINO DE HEPATOTOXICIDAD</p> <p>Susana Bautista-Hernández, Socorro Herrera-Meza, Luz Alicia Pascual-Pineda, Alberto Sánchez-Medina* Instituto de Química Aplicada, Universidad Veracruzana, Av. Dr. Luis Castelazo Ayala s/n, Col. Industrial-Ánimas, C.P. 91190, Xalapa, Veracruz, México</p>
Tercer lugar	<p>SÍNTESIS DE COMPLEJOS METÁLICOS DINUCLEARES DERIVADOS DE 1,2,3-TRIAZOL-5-ILIDENOS FUNCIONALIZADOS CON FLUORENO</p> <p>Emmanuel Campos Dominguez, Daniel Mendoza Espinosa Área Académica de Química, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, Carretera Pachuca- Tulancingo Km. 4.5, Mineral de la Reforma, Hidalgo 42090, México</p>

PREMIACIÓN

Modalidad: Presentación de cartel

Nivel Licenciatura

Primer lugar	DETERMINACIÓN DE LA DINÁMICA DE HIDRÓLISIS Y MUTORROTACIÓN DE DISACÁRIDOS POR RMN Marco Josué Ramos Paredes, Apolo Velasco Ramírez, José Manuel López Alcaraz, Isabel Iraí Aguilar de la Portilla, Víctor Manuel González Díaz, Armando Ariza Castolo. Departamento de Química, Cinvestav-IPN
Segundo lugar	SÍNTESIS, ESTUDIO ESTRUCTURAL MEDIANTE RMN Y PROPIEDADES ANTIPROLIFERATIVAS DE DOS ENANTIÓMEROS DERIVADOS DEL β-NAFTOL Maritza Mendoza de la Cruz, Shiomara Gadsden Andrade*, Gabriela A. Sosa Ortiz, Tomás Guerrero*, Universidad Veracruzana, Instituto de Ciencias Básicas, Dr. Luis Castelazo Ayala s/n, Col. Industrial Ánimas, Xalapa, Ver. 91190, México
Tercer lugar	ESTUDIO DE COMPLEJOS DE TRIFENILESTAÑO (IV) DERIVADOS DE CARBOXILATOS DE ISATINA E INDIRUBINA Jose Luis Maya-García, ^a Marcela López-Cardoso, ^{a*} Gabriela Vargas-Pineda, ^a Perla Román-Bravo, ^a Raymundo Cea-Olivares. ^{b*} a) Centro de Investigaciones Químicas, IICBA, Universidad Autónoma del Estado de Morelos. Av. Universidad 1001, C.P. 62209 Cuernavaca, Morelos, México; b) Instituto de Química, Universidad Autónoma de México, Circuito Exterior, Ciudad Universitaria, 10810, Ciudad de México, México.

PREMIACIÓN

Modalidad: Presentación de cartel

Nivel Maestría

Primer lugar	SÍNTESIS Y ELUCIDACIÓN DE HIDRAZONAS DERIVADAS DE ALDEHIDOS AROMÁTICOS Jorge R. Belchez Rodríguez* ^{1,2} , Joel L Terán ² , Alan Carrasco Carballo ¹ . ¹ Laboratorio de Elucidación y Síntesis en Química Orgánica, CQ, ICUAP, BUAP, Puebla, México. ² Centro de Química, Instituto de Ciencias, ICUAP, BUAP, Puebla, México.
Segundo lugar	SÍNTESIS Y ELUCIDACIÓN DE DIPÉPTIDOS CATIÓNICOS Zurysadai Corrales Ocampo*, Lemuel Pérez Picaso, Miguel Ángel Peña Rico, Omar Viñas Bravo, Roxana Martínez Pascual y Adolfo López Torres. Centro de Investigaciones Científicas, Instituto de Química Aplicada, Universidad del Papaloapan, Circuito Central 200, Col. Parque Industrial, Tuxtepec, Oax. 68301.
Tercer lugar	SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN POR RMN DE COMPUESTOS DERIVADOS DE MORFOLINA CON POSIBLE ACTIVIDAD BIOLÓGICA ¹ Andrea Sosa-Barrios, ² Rosmarbel-Morales Nava, ² Jorge Juárez-Posadas* ¹ Maestría en Ciencias Químicas, Posgrado en Ciencias Químicas, BUAP. ² Laboratorio de Química Básica, Centro de Química ICUAP, BUAP.

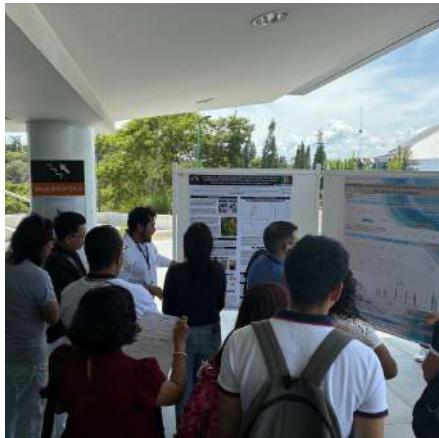
PREMIACIÓN

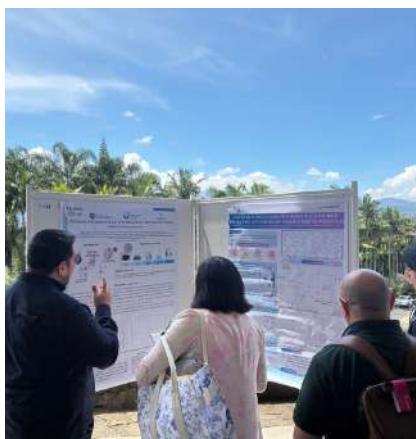
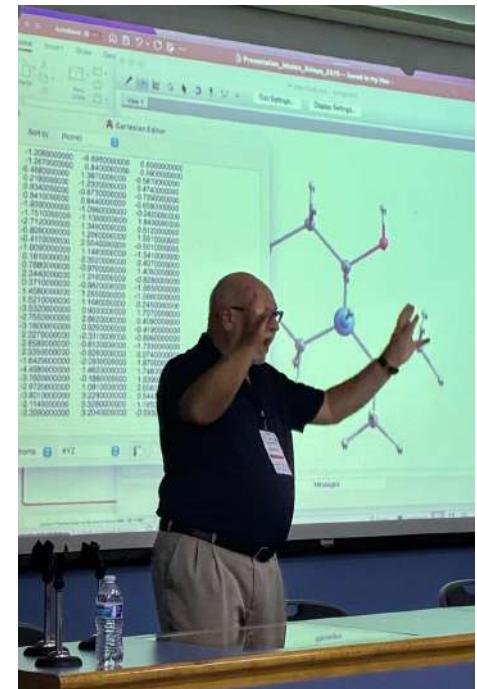
Modalidad: Presentación de cartel

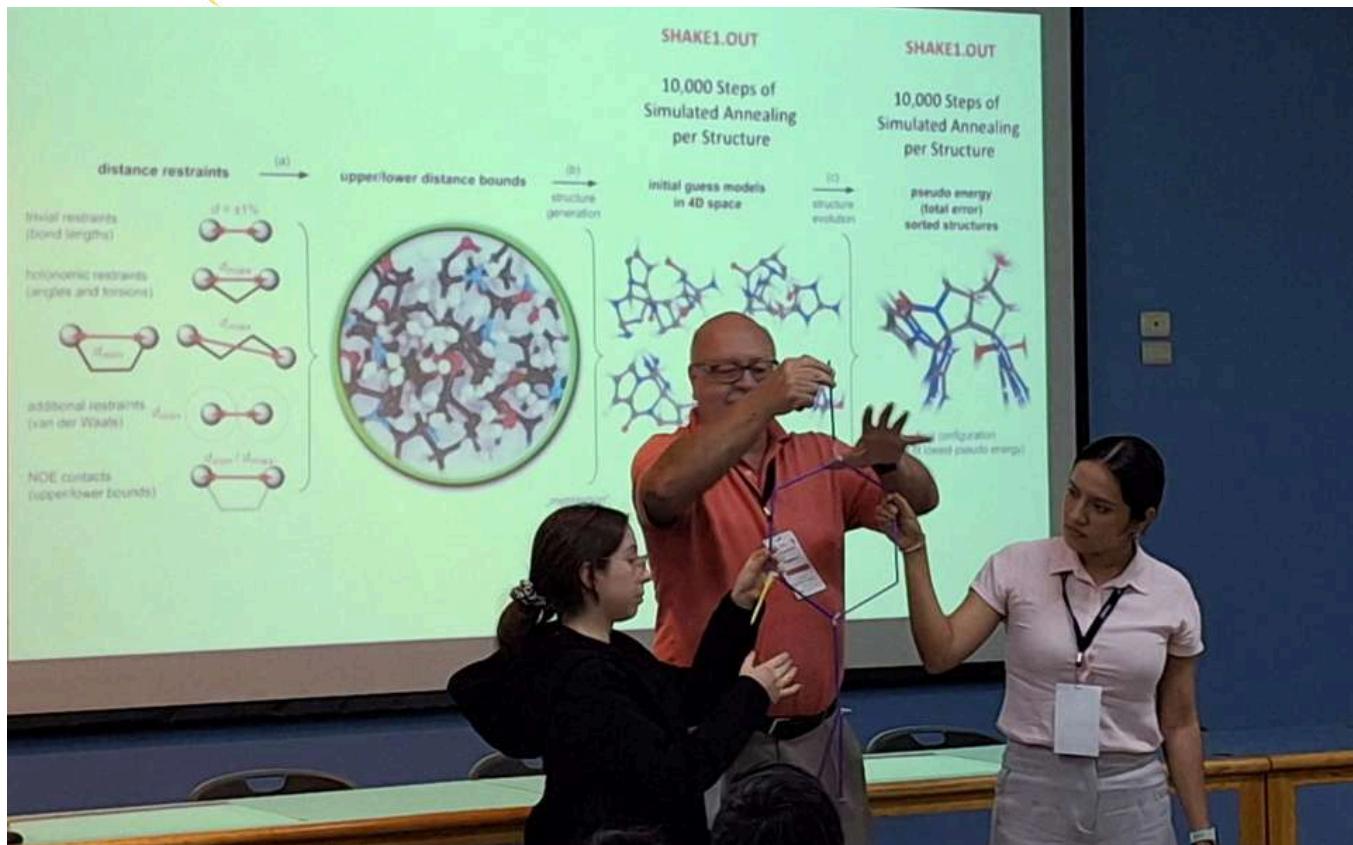
Nivel Doctorado

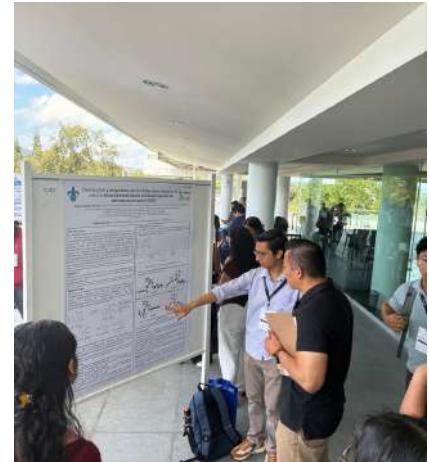
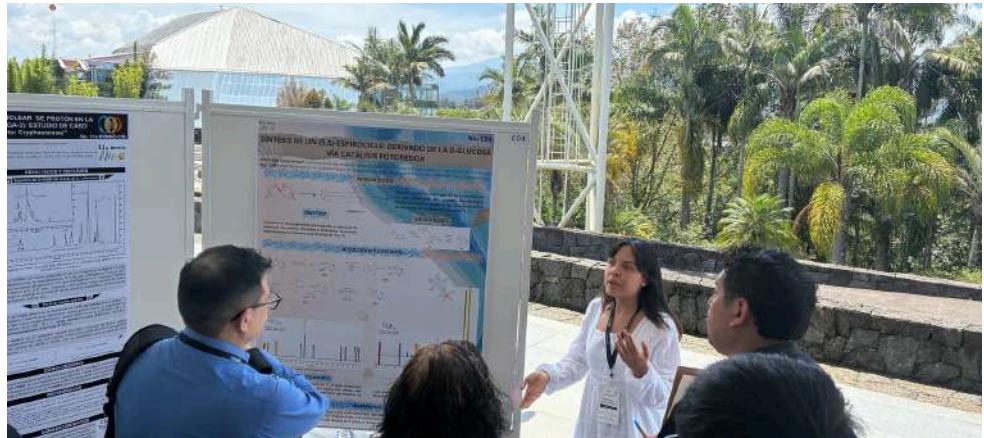
Primer lugar	<p>ELUCIDACIÓN ESTRUCTURAL POR RMN DE UN NUEVO CICLOPÉPTIDO OBTENIDO DE LAS SEMILLAS DE <i>ANNONA DIVERSIFOLIA</i> SAFF.</p> <p>Ulises Murrieta-Dionicio^{1*}, Benito Reyes-Trejo¹, Holber Zuleta-Prada¹, José Federico del Río Portilla²</p> <p>¹Universidad Autónoma Chapingo. Texcoco Edo. de Méx., México. ²Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad Universitaria, Delegación Coyoacán, México.</p>
Segundo lugar	<p>EVALUACIÓN DE LA GENERACIÓN DE ${}^1\text{O}_2$ DE COLORANTES COSMÉTICOS MEDIANTE LA FOTO-OXIDACIÓN DE ERGOSTEROL</p> <p>Karmen Manzano¹, Fernanda Vázquez-Ortega², Limni Ramírez¹, Roberto Hernández¹, Irene Lagunes², Ángel Trigos^{2*}, ¹Doctorado en Micología Aplicada, Universidad Veracruzana, Xalapa, México, ²Centro de Investigación en Micología Aplicada, Universidad Veracruzana, Xalapa, México. Correspondencia: calle médicos 5, Unidad del Bosque, 91010, Xalapa-Veracruz</p>
Tercer lugar	<p>POTENCIAL ANTIOXIDANTE DEL 3-METOXICATECOL OBTENIDO DEL HONGO MARINO <i>Daldinia eschscholtzii</i></p> <p>Rubén Antonio García-Zavaleta^{1,2}, Karla G. Olivo-Flores², Ángel Trigos², Manuel E. Medina² Alan Couttolenc³, César Espinoza^{2*}</p> <p>¹Doctorado en Micología Aplicada, Centro de Investigación en Micología Aplicada, Universidad Veracruzana, 91010, Xalapa-Enríquez, Veracruz, México. ²Centro de Investigación en Micología Aplicada, Universidad Veracruzana, 91010, Xalapa-Enríquez, Veracruz, México. ³Facultad de Química Farmacéutica Biológica, Universidad Veracruzana, 91000, Xalapa-Enríquez, Veracruz, México.</p>

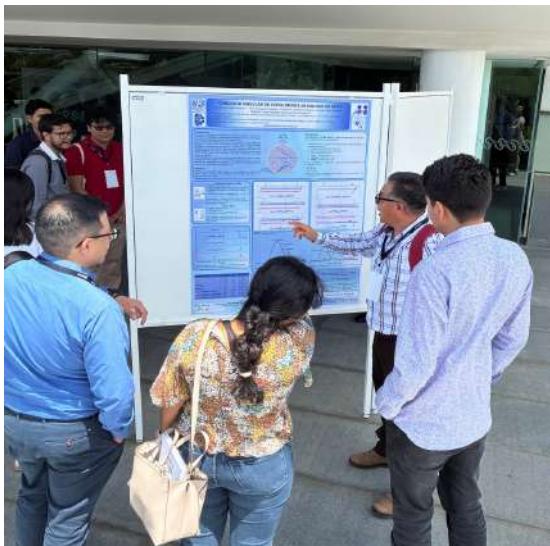
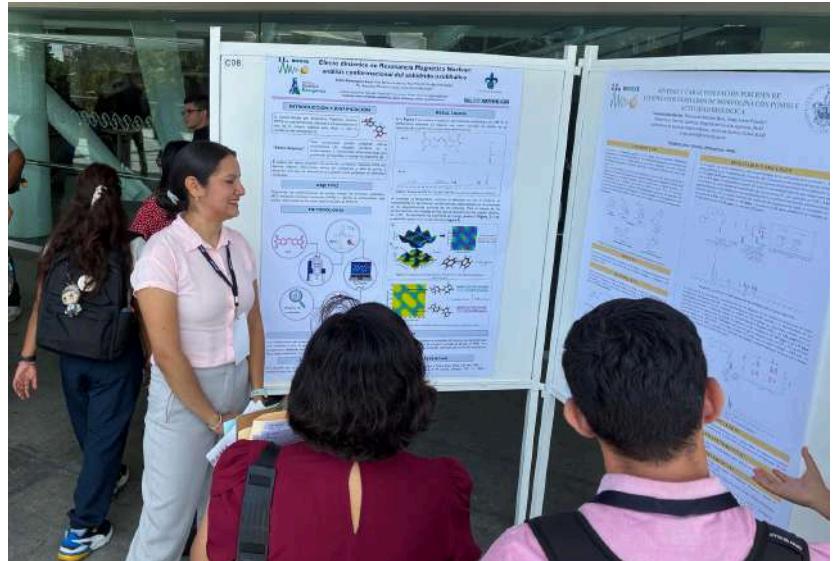
Fotos





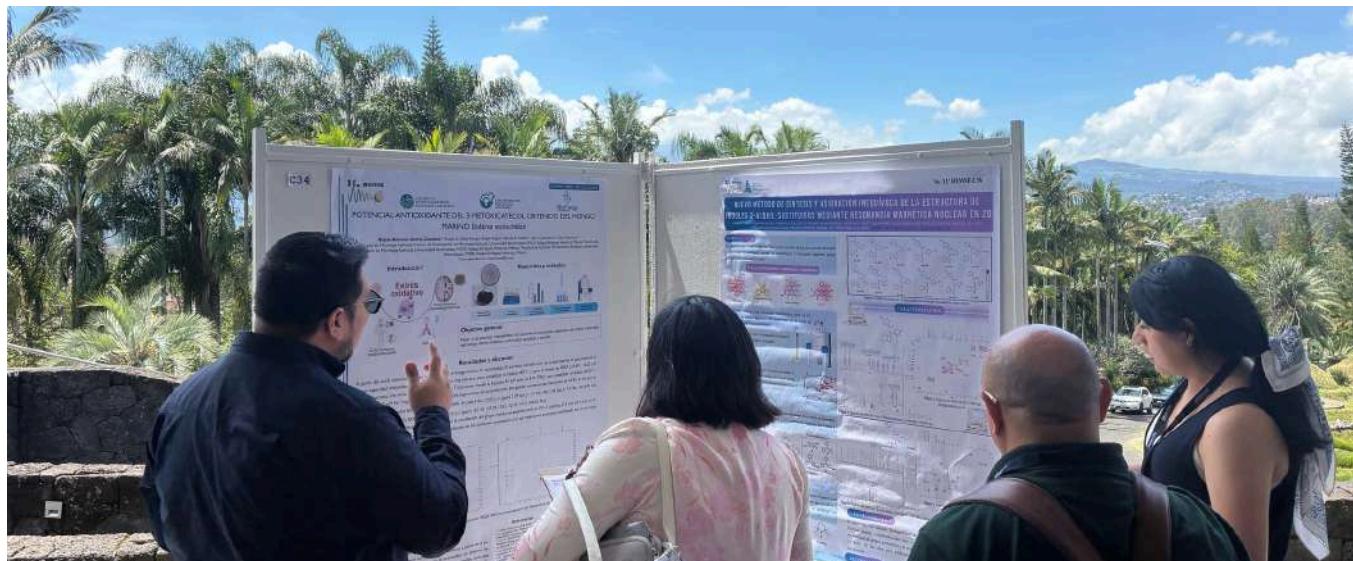
















¡Gracias!

**Nos vemos en la 12a RRMNE en Cuernavaca,
Morelos.**

