

Facultad de Ciencias Químicas
Universidad de Colima

IV

SIMPOSIO
MEXICANO de
QUÍMICA SUPRAMOLECULAR

COLIMA

15 — 17 AGOSTO 2018

MEMORIAS



EDUCACIÓN CON
RESPONSABILIDAD
SOCIAL

UNIVERSIDAD DE COLIMA



"El saber de mis hijos
hará mi grandeza"



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL
ESTADO DE MORELOS



UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTÓNOMA DE
MÉXICO

PRESENTACIÓN

El comité organizador invita cordialmente a participar en el **IV Simposio Mexicano de Química Supramolecular**, el cual se realizará del 15 al 17 de agosto de 2018 en el Auditorio de la Facultad de Ciencias Políticas y Sociales de la Universidad de Colima, Colima, México.

Este evento cubrirá diversas áreas científicas afines a la química supramolecular: Química macrocíclica, Sistemas anfitrión-huésped, Reconocimiento iónico y molecular, Sensores moleculares, Ingeniería de cristales, Cocristales farmacéuticos, Rotaxanos y catenanos, Polímeros supramoleculares, Autoensamble, Máquinas moleculares, Nanomateriales y Química medicinal supramolecular.

OBJETIVOS

- Reunir a todos los interesados en el área de la química supramolecular con el fin de que den a conocer sus trabajos de investigación y favorecer el intercambio de ideas.
- Brindar un foro en el que los estudiantes puedan presentar los resultados más recientes y discutir los aspectos más relevantes de su investigación.
- Promover la interacción de todos los asistentes con expertos nacionales e internacionales de la química supramolecular.

Atentamente
Comité Organizador 2018

RED TEMÁTICA DE QUÍMICA SUPRAMOLECULAR

Dra. Rosa Elena Navarro Gautrin (SON)

Dra. Karen L. Ochoa Lara (SON)

Dra. Georgina Pina Luis (BC)

Dra. Hisila Santacruz Ortega (SON)

Dr. Herbert Höpfl Bachner (MOR)

Dr. Anatoli Iatsimirski (CDMX)

Dr. Francisco Javier Martínez Martínez (UdeC)

Ochoa Lara (SON)

Dr. Adrián Ochoa Terán (BC)

Dr. Enrique F. Velázquez Contreras (SON)

COMITÉ ORGANIZADOR

Dr. Francisco Javier Martínez Martínez (UdeC),
COORDINADOR

Dra. Hortensia Parra Delgado (UdeC)

Dra. Nancy Evelyn Magaña Vergara (UdeC)

Dr. Ángel Andrés Ramos Organillo (UdeC)

Dr. Néstor Mendoza Muñoz (UdeC)

Dr. Zeferino Gómez Sandoval (UdeC)

Dr. Julio Hernández Díaz (UdeC)

Dr. Roberto Muñoz Valencia (UdeC)

Dra. Rosa Elena Navarro Gautrin (UNISON)

Dra. Karen Lilian Ochoa Lara (UNISON)

Dr. Alex Salazar Medina (UNISON)

Dra. Itzia Irene Padilla Martínez (IPN)

Dr. Herbert Höpfl Bachner (UAEMor)

DIRECTORIO

M. A. JOSÉ EDUARDO HERNÁNDEZ NAVA
RECTOR

MTRO. CHRISTIAN JORGE TORRES ORTÍZ ZERMEÑO
SECRETARIO GENERAL

DR. CARLOS EDUARDO MONROY GALINDO
COORDINADOR GENERAL DE DOCENCIA

DRA. SARA G. MARTÍNEZ COVARRUBIAS
DIRECTORA GENERAL DE EDUCACIÓN SUPERIOR

ING. ROSENDO SÁNCHEZ VELASCO
DIRECTOR GENERAL DE EDUCACIÓN CONTINUA

C. P. ADRIÁN LÓPEZ VIRGEN
DELEGADO REGIONAL NO. 4

DR. FRANCISCO JAVIER BARRAGÁN VÁZQUEZ
DIRECTOR DE LA FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS

PROGRAMA

Miércoles 15

Jueves 16

Viernes 17

8:45-9:00	Inauguración		
9:00-10:00	Plenaria Dr. Narayan Hosmane Dendritic and Nanostructured Boron Compounds for Cancer Therapy Northern Illinois University EUA	Plenaria Dr. Pascal G. Lacroix Ruthenium nitrosyl complexes: from molecular switches to biological applications LCC-CNRS Francia	Plenaria Drochss P. Valencia Estudio electroquímico de la interacción antígeno-anticuerpo, perspectivas para la química supramolecular y procesos de reconocimiento molecular Pontificia Universidad Javeriana Colombia
10:00-11:00	Trabajos cortos T1-T3	Trabajos cortos T9-T11	Trabajos cortos T17-T19
11:00-11:30	RECESO		
11:30-12:30	C1 Dr. Jesús Valdés Martínez Estudio del efecto de sustituyentes halógeno sobre las interacciones intermoleculares en moléculas multifuncionales UNAM	C3 Dra. Mónica Correa Téllez Diseño termodinámico de polímeros dosificadores de fármaco IPN	C5 Dr. Jorge González G. Materiales nanoestructurados para separaciones moleculares U. de Colima
12:30-13:30	Trabajos cortos T4-T6	Trabajos cortos T12-T14	Trabajos cortos T20-T22
13:30-16:00	COMIDA		
16:00-17:00	C2 Dra. Karen Ochoa Lara Interacciones Supra moleculares en el estado sólido UNISON	C4 Dr. Hugo Tlahuext Romero Derivados del alcaloide tetrandrina: sistemas versátiles para posibles aplicaciones en biomedicina UAEMor	
17:00-18:00	Trabajos cortos T7-T8	Trabajos cortos T15-T16	
18:00-20:00	SESIÓN DE CARTELES		



SEDE DE CONFERENCIAS

AUDITORIO DE LA FACULTAD DE CIENCIAS POLÍTICAS Y SOCIALES
UNIVERSIDAD DE COLIMA

PLENARIAS

Dendritic and Nanostructured Boron Compounds for Cancer Therapy

Dr. Nayaran Hosmane

Northen Illinois University, USA.

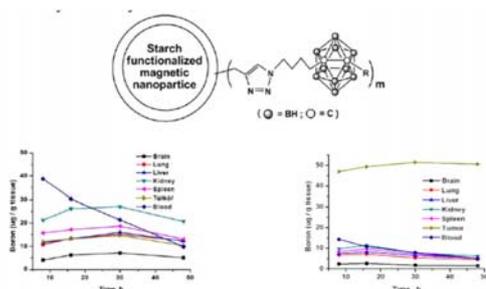
hosmane@niu.edu



ABSTRACT

In recent years, much efforts have been devoted to developing nanomaterials-based boron drugs for neutron capture therapy (NCT) and to date, most of the studies have proved reasonably promising. Conversely, further *in vivo* studies and clinical trials are needed to establish them as appropriate boron carriers; this is especially so with the relatively novel boron nanotubes and magnetic nanoparticles. More advanced forms of boron nanotubes can be anticipated as much interest in their synthesis as their future applications. Thus, boron neutron capture therapy (BNCT) is a promising treatment for

malignant brain tumors as well as for other types of cancers, such as, liver, prostate, bladder, breasts, head and neck tumors. Current research focuses on both the design and synthesis of high boron containing compounds as BNCT agents, and the search for suitable delivery vehicles. To be suitable BNCT agents, the problem of their low water-solubility needs to be resolved by chemical



Synthesis and Biodistribution of Carborane-Appended Magnetic Nanocomposites Without (a) and With (b) External Magnet (1.14 Tesla)

modification. In the case of magnetic nanoparticles, strategies are required to counter their tendency of embolization and their unclear cytotoxicity must be resolved.

REFERENCES

Zhu, Y.; Koh, C. Y.; Maguire, J. A.; Hosmane, N. S.; Recent developments in the Boron Neutron Capture therapy (BNCT) driven by nanotechnology. *Cur. Chem. Biol.* **2007**, *1*, 141.

**Estudio del efecto de sustituyentes
halógeno sobre las interacciones
intermoleculares en moléculas
multifuncionales**

Dr. Jesús Valdés Martínez

Universidad Nacional Autónoma de México.



Derivados del alcaloide tetrandrina: sistemas versátiles para posibles aplicaciones en biomedicina

Karen L. Ochoa Lara

*Departamento de Investigación en Polímeros y Materiales,
Universidad de Sonora, Hermosillo, Sonora, México.*

karenol@polimeros.uson.mx



Resumen

La *S,S*-(+)-tetrandrina es un alcaloide bisbencilisoquinolín medicina tradicional china, que posee diversas propiedades farmacológicas tales como antimicrobiana, antiinflamatoria y anticancerígena, entre otras.¹ Nuestro grupo de investigación se ha destacado por ser pionero en la síntesis y caracterización de derivados de la tetrandrina vía la alquilación de sus nitrógenos, así como en los estudios de reconocimiento molecular de estos compuestos como receptores de aniones de importancia biológica.²⁻⁶ Debido al gran interés que existe por este alcaloide, recientemente nos hemos enfocado en la obtención de una nueva serie de derivados catiónicos.⁷

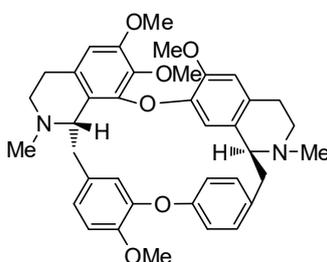


Figura 1. Estructura química de la *S,S*-(+)-tetrandrina.

En esta plática se presentarán algunos resultados relevantes de los estudios de reconocimiento molecular de los compuestos como receptores de diversas secuencias de ds-ADN, en medio acuoso y pH fisiológico. Los resultados obtenidos hasta el momento demuestran que los derivados unen ADN con alta afinidad y selectividad. En este contexto, se abordarán algunos estudios por microscopía de fluorescencia que revelan el potencial de los derivados como posibles sondas fluorescentes. Asimismo, se incluirán los estudios de la actividad anti-proliferativa de algunos compuestos en diversas líneas tumorales, los cuales demuestran que los compuestos tienen buen potencial como agentes anticancerígenos.

Por último, se presentarán algunos resultados relacionados con el análisis por difracción de rayos X de monocristal de una serie de derivados “tipo bis” del alcaloide, los cuales demuestran la influencia del sustituyente en el arreglo estructural y en su capacidad de auto-ensamblarse en estado sólido.

Los resultados sugieren que este tipo de materiales orgánicos porosos podrían tener diversas aplicaciones como nano-cápsulas de fármacos y biomoléculas o como materiales sensores, entre otros.

Conclusiones

Las características estructurales, fisicoquímicas y biológicas de los derivados de la tetrandrina obtenidos por nuestro grupo, les confiere una gran versatilidad que los hace buenos candidatos para posibles aplicaciones en biomedicina.

Referencias

1. Bhagya, N., Chandrashekar, K.R. *Phytochemistry*, **2016**, 125, 5–13.
2. Lara, K.O. *et al. J. Phys. Org. Chem.*, **2001**, 14, 453–462.
3. Lara, K.O. *et al. Org. Biomol. Chem.*, **2004**, 2, 1712–1718.
4. Lara, K.O. *et al. ARKIVOC*, **2005**, vi, 293–306.
5. Moreno-Corral, R., Lara, K. O. *Supramol. Chem.*, **2008**, 20, 4, 427–435.
6. Wong-Molina, A. *et al. J. Biomed. Nanotechnol.*, **2008**, 4, 1–10.
7. Calvillo-Páez *et al. Chem. Biol. Interact.*, **2018**, 286, 34–44.

Ruthenium nitrosyl complexes: from molecular switches to biological applications

Dr. Pascal G. Lacroix

Laboratoire de Chimie de Coordination (LCC-CNRS)
205 route de Narbonne, 31077 Toulouse (France)



Nitric oxide (NO \cdot radical) is a key actor in numerous biological processes¹ and its investigation has led to the Nobel Prize in medicine in 1998. However, its action in human tissues strongly depends on its concentration. Therefore, there is a need for efficient precursors being able to deliver NO \cdot locally and quantitatively. Along this line, ruthenium-nitrosyl [Ru(NO)] complexes have emerged as promising candidates capable to release NO \cdot under irradiation exclusively, taking advantage of the non-invasive character of light.

From a brief introduction of our initial interest devoted to nonlinear optical switches, the reason for our gradual interest for Ru(NO) complexes will be presented. The strategy employed for releasing NO \cdot in the therapeutic window (\approx 700-1200 nm) by two-photon absorption (TPA) will be developed on different molecular targets.² The photochemical behavior (quantum yield of NO \cdot release and TPA cross-sections) will be compared in organic media and in water, and the action of these complexes on cancer cells will be presented.

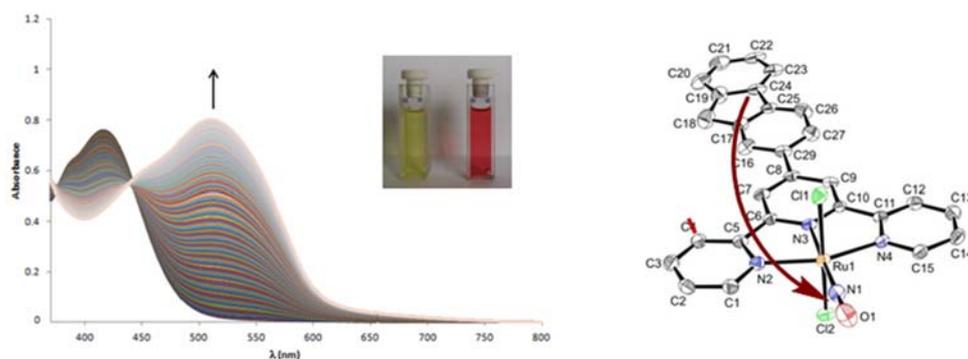


Photo-release of NO \cdot monitored spectroscopically

References

- 1 (a) Nitric Oxide and Cancer: Prognosis, Prevention and Therapy, B. Bonavida Ed., Springer, 2010.
(b) Nitric Oxide: Biology and Pathology, L. J. Ignarro Ed.; Academic Press: San Diego, CA, 2000.
- 2 (a) J. Akl, I. Sasaki, P.G. Lacroix, I. Malfant, S. Mallet-Ladeira, P. Vicendo, N. Farfán, R. Santillan, Dalton Trans. 2014, 45, 12721-12733. (b) J. Akl, I. Sasaki, P.G. Lacroix, V. Hugues, P. Vivendo, M. Bocé, S. Mallet-Ladeira, M. Blanchard-Desce, I. Malfant, Photochem. Photobio. Sci. 2016, 15, 1484-1491.
(c) A. Enriquez-Cabrera, I. Sasaki, V. Bukhanko, M. Tassé, S. Mallet-Ladeira, P.G. Lacroix, R.M. Barba-Barba, G. Ramos, N. Farfán, Z. Voitenko, I. Malfant, Eur. J. Inorg. Chem. 2017, 1446-1456. (d) A. Enriquez-Cabrera, P.G. Lacroix, I. Sasaki, S. Malet-Ladeira, N. Farfan, R.M. Barba-Barba, G. Ramos-Ortiz, I. Malfant, Eur. J. Inorg. Chem. 2018, 531-543

Diseño termodinámico de polímeros dosificadores de fármaco

Dra. Mónica Corea Téllez

Instituto Politécnico Nacional, Escuela Superior de Ingeniería Química e Industrias Extractivas, UPALM, San Pedro Zacatenco, Del. Gustavo A. Madero, Ciudad de México, C.P.07738, México



Mónica Corea,¹ José Manuel del Río,² Teresa Leguizamo,³ Blanca García-Pérez,³ Jean-Pierre E. Grolier⁴

¹Instituto Politécnico Nacional, Escuela Superior de Ingeniería Química e Industrias Extractivas, UPALM, San Pedro Zacatenco, Del. Gustavo A. Madero, Ciudad de México, C.P.07738, México

²Instituto Mexicano del Petróleo, Eje Central Lázaro Cárdenas 152, Col. San Bartolo Atepehuacan, del. Gustavo A. Madero, Ciudad de México, C.P. 07730, México

³Instituto Politécnico Nacional, Escuela Nacional de Ciencias Biológicas, UPLC, Prolongación de Carpio y Plan de Ayala S/N. Santo Tomás, del. Miguel Hidalgo, Ciudad de México, C.P. 11340, México

⁴ Institute of Chemistry of Clermont-Ferrand UMR 6296, 24 Avenue des Landais, 63177 Aubière Cedex, France

Stimuli-responsive hydrogels exhibit a change in their physical or chemical properties as a function of environmental changes [1-4]. They have been used in many potential applications areas as medicine [5], biotechnology [6], industry [7], and environmental science, among others. A hydrogel is a network of hydrophilic polymers that can swell and absorb/desorb a large amount of aqueous solution while maintain its structure. In this work, a series of polymeric hydrogels functionalized with acrylic acid were synthesized by emulsion polymerization techniques. The sensitivity to pH was evaluated by volumetric and calorimetry properties. The results showed that the hydrogels have conformational changes when they are submitted to alkali treatment. With this behavior the materials were tested for absorb and desorb oleanolic acid to

different pH. The cytotoxicity of hydrogels was determined in murine macrophages by 3(4,5 dimethyl-2-thiazolyl diphenyltetrazolium) bromide (MTT) and their internalization of macrophages was determined by transmission electronic microscopy.

References

- [1] Paris R. Quijada-Garrido I. Eur Polym J. 2009; 45 (12): 3418-3425.
- [2] Paris R. Quijada-Garrido I. Eur. Polym J 2010;46(11):2156-2163.
- [3] Gao X. Cao Y. Song X. Zhnag Z., Xiao C., He C., et. Al. J. Mater. Chem B 2013;1 (41):5578-5587.
- [4] Montero-Rama M. P., Liras M., García O., Quijada Garrido I. Eur Polym J. 2015;63:37-44.
- [5] Banwell E.F., Abelardo E.S., Adams D.J., Birchall M.A., Corrigan A., Donald A.M., Woolfson D.N. Nat. Mater. 8(7) (2009) 596-600.
- [6] Chilkoti A., Christensen T., MacKay J.A. Curr. Opin. Chem. Biol. 10 (6) 652-657.
- [7] Gad Y.H., Radiat. Phys. Chem. 77 (9) (2008) 1101-1107.

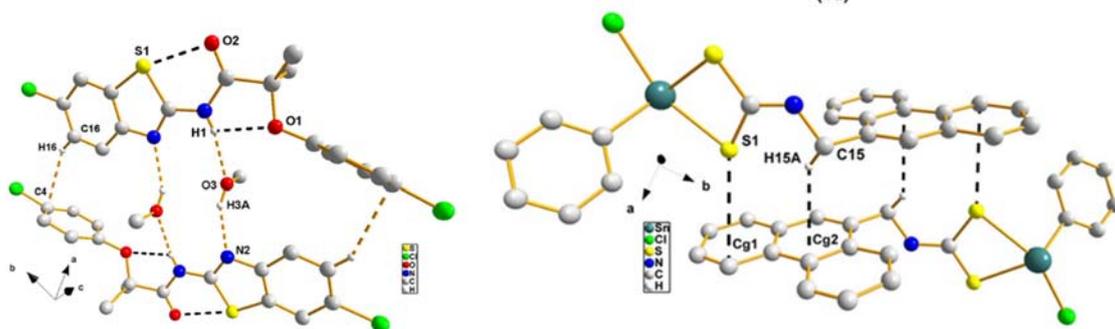
Interacciones Supra moleculares en el estado sólido

Dr. Hugo Tlahuext Romero

Centro de Investigaciones Químicas, IICBA, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Av. Universidad 1001, Chamilpa, Cuernavaca 62209, Morelos, México.
tlahuext@uaem.mx



El objetivo de la ingeniería de cristales es establecer conexiones entre la estructura molecular y supramolecular en base a interacciones no covalentes inter- e intramoleculares. El enlace de hidrógeno es un ejemplo clásico de interacción intra- y/o intermolecular que es específico y altamente direccional. Por ello, promueve arreglos geométricos óptimos de diferentes sintones supramoleculares.ⁱ Interacciones débiles tales como C-H...X (X= O, N, S, F, Cl, Br, I), contactos $\pi\cdots\pi$, C-H... π , e interacciones hipervalentes X...X, X...Y son identificados como fuerzas importantes en la estabilización de los sólidos cristalinos.^{ii,iii} En esta contribución presentare el estudio cristalográfico de interacciones supramoleculares del tipo puente de hidrógeno O-H...O en aldonamidas polihidroxiladas, interacciones hipervalentes C=O...S en 1,3-benzotiazoles,^{iv} interacciones M-O, M-S catión- π (areno) y catión- π (d π c) en estructuras de ditiocarbamato de metales alcalinos, e interacciones S... π observadas en ditiocarbamatos de clorodiorganoestaño(IV).^v Estas interacciones cooperativas son responsables del ensamble de las moléculas en los sólidos cristalinos, juegan un papel importante en el proceso de reconocimiento molecular, en la estabilización de complejos de inclusión, en la reactividad intrínseca de las moléculas, entre otros.



Agradecimiento al LANEM y al CONACYT (proyecto CB2010/158098) por el financiamiento recibido.

ⁱ G. R. Desiraju, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.*, 1995, **34**, 2311-2327.

ⁱⁱ J. -M. Lehn, J. L. Atwood, J. E. D. Davies, D. D. MacNicol, and F. Vögtle, *Comprehensive Supramolecular Chemistry*, Pergamon, Oxford, 1996.

ⁱⁱⁱ V. I. Minkin and R. M. Minyaev, *Chem. Rev.* 2001, **101**, 1247- 1265.

^{iv} G. Navarrete-Vázquez, A. Alaniz-Palacios, M. Tlahuextl, M. Bernal-Uruchurtu, H. Tlahuext, *CrystEngComm*, 2012, **14**, 1256-1263.

^v M. A. Claudio-Catalán, F. Medrano, K. I. Rivera-Márquez, N. A. Rodríguez-Urbe, R. Pérez-González, H. Tlahuext, C. Godoy-Alcántar, *Polyhedron* 2018, **146**, 55-64.

Estudio electroquímico de la interacción antígenoanticuerpo, perspectivas para la química supramolecular y procesos de reconocimiento molecular

Dr. Drochss P. Valencia

Facultad de Ingeniería, Departamento de Ciencias Naturales y Matemáticas, Pontificia Universidad Javeriana, Santiago de Cali, Colombia. drochss.valencia@javerianacali.edu.co



Introducción

El estudio de compuestos organometálicos derivados de aminoácidos, péptidos y ácidos nucleicos han recibido en los últimos años un interés especial, porque permiten evidenciar el diseño estructural, y la naturaleza de los enlaces de hidrógeno inter e intramoleculares, que dan cuenta de toda la bioquímica. En electroquímica el interés principal de estos biocompuestos organometálicos reside en el desarrollo de biosensores, capaces de detectar e identificar compuestos complementarios para la identificación y cuantificación de virus, enfermedades y o deficiencias de diferente índole médica. Péptidos sintéticos pueden ser reconocidos específicamente por anticuerpos a través de la interacción antígenoanticuerpo debido a la alta estabilidad de los compuestos formados (K_d 10^6 - 10^9 mol L^{-1}) [1], haciendo los residuos peptídicos sean adecuados como sondas moleculares para diagnóstico médico. En consecuencia, el presente documento tiene como objetivo mostrar cómo se pueden diseñar un electrodo modificado con un péptido como un elemento sensor para de la interacción anticuerpoantígeno y la determinación de la presencia del virus de papiloma Humano (VPH) en ratones. Se investigó la influencia de diferentes parámetros experimentales, tales como la cantidad de suero de ratones en la respuesta del biosensor, para optimizar la respuesta[2].

Resultados y discusión

Se sintetizó el péptido SPINNTKPHEAR (1) como sonda para detectar el anticuerpo anti-peptídico del VPH en suero preinmune (control) y postinmune de ratones inmunizados con un péptido polimérico CGSPINNTKPHEARGC (2). El péptido 2 corresponde a conjugados de péptido-polímero sintético del péptido 1. Consiste en dos unidades CG extra unidas a cada lado del péptido. Los residuos de cisteína (C) desempeñan un papel valioso por reticulación en el péptido, lo que aumenta la rigidez del péptido mediante la formación de enlaces disulfuro y confiere resistencia proteolítica y se usa glicina (G) como espaciador. El péptido 1, además se sintetizó con

una unidad de ferroceno y un espaciador de ácido 6-aminohexano Fc-Ahx-SPINNTKPHEAR (1AFc), para el diseño de la superficie de biodetección, de tal forma de ser usado como sonda electroquímica, para esto una solución de 1AFc sobre Nafion/DMF, fue depositada sobre un electrodo de oro utilizando el método de drop-casting. El comportamiento electroquímico del electrodo modificado con 1AFc se estudió en solución acuosa de 0.1 mol L⁻¹ de PBS, pH = 7.4. La Fig. 1 muestra los voltamogramas (2°, 20° y 50°) registrados a 0,10 Vs⁻¹ y se puede observar un par de picos definidos correspondientes al comportamiento redox del grupo ferrocenilo en el péptido. Los valores del potencial pico anódico y catódico se encuentran a 0.35 y 0.24 V, respectivamente. Los valores de corriente de pico aumentaron con cada ciclo de potencial, pero no se observaron cambios significativos en la corriente después del 50° ciclo. Se permitió que el electrodo modificado con 1AFc interactuara con el suero preinmune (control) durante aproximadamente 20 minutos, tiempos típicos para alcanzar una respuesta electroquímica estable. Y se evaluó la respuesta electroquímica evidenciando las regiones donde el electrodo identifica el VPH con respecto a la matriz biológica natural de las células.

Conclusiones

Se desarrolló un biosensor electroquímico con ferroceno-ácido amino hexanoico (Fc-Ahx-SPINNT K PHEAR) inmovilizado sobre un electrodo de oro. Se obtuvo 1AFc mediante síntesis de péptidos en fase sólida usando la estrategia Fmoc / tBu.

Referencias

- [1]B. Piro, A. Kapella, V. H. Le, G. Anquetin, Q. D. Zhang, S. Reisberg, V. Noel, L. D. Tran, H. T. Duc, M. C. Pham, *Electrochim Acta* 2011, 56, 10688.
- [2]D. P. Valencia, L. M. F. Dantas, A. Lara, J. Garcia, Z. Rivera, J. Rosas, M. Bertotti, *J Electroanal Chem* 2016, 770, 50.

Materiales nanoestructurados para separaciones moleculares

Dr. Jorge González González

*Facultad de Ciencias Químicas
Universidad de Colima*



ÍNDICE

TRABAJOS ORALES

LIBERACIÓN CONTROLADA DE FÁRMACOS DE NANOPARTÍCULAS MCM-41 RECUBIERTAS CON POLI(β -AMINO ESTER) SENSIBLE A pH	...1
SÍNTESIS DE NAFTALENDIIMIDAS NUEVAS Y ESTUDIO DE SUS PROPIEDADES ÓPTICAS PARA LA DETERMINACIÓN DE CATIONES	...2
SÍNTESIS Y ANÁLISIS ESTRUCTURAL DE COMPUESTOS PENTACOORDINADOS DE DIORGANOESTAÑO (IV) DERIVADOS DE 3-AMINO-2-NAFTOL	...3
SÍNTESIS y FOTOLUMINISCENCIA DE COMPLEJOS DE Eu(III) COORDINADOS AL LIGANTE TPTZ INMERSOS EN MATRICES DE POLIMETILMETACRILATO	...4
SÍNTESIS DE NUEVOS QUIMIOSENSORES FLUORESCENTES	...5
DISEÑO DE MACROCICLOS DERIVADOS DE COMPUESTOS DE ORGANOSILICIO Y ORGANOESTAÑO	...6
SÍNTESIS DE NUEVAS PLATAFORMAS DE QUITOSAN-GLUTARALDEHÍDO PARA INGENIERÍA DE TEJIDO USANDO BASES DE SCHIFF	...7
POLIMERIZACIÓN POR ARILACIÓN DIRECTA DE POLI(3-HEXILTIOFENOS) REGIORREGULARES Y SU APLICACIÓN EN CELDAS SOLARES ORGÁNICAS	...8
SÍNTESIS DE COPOLÍMEROS D-A VÍA ARILACIÓN DIRECTA PARA SU APLICACIÓN EN CELDAS SOLARES ORGÁNICAS	...9
FORMACIÓN DE ENSAMBLES DISCRETOS A PARTIR DE BLOQUES METÁLICOS DI- Y TRINUCLEARES	...10
TEACHING BORONIC ESTERS NEW TRICKS: TEMPLATES OF [2+2]-PHOTOCYCLOADDITIONS OF OLEFINS IN THE SOLID STATE	...11

ESTUDIOS DE INTERACCIÓN DE DITIOCARBAMATOS DE DIORGANOESTAÑO (IV) DERIVADOS DE BISNAFTALENDIIMIDA CON IONES ACETATO, FLUORURO Y DIHIDRÓGENOFOSFATO	...12
DISEÑO DE UN BIOMATERIAL BASADO EN LA INMOVILIZACIÓN DE ADN POR LA TÉCNICA DE SOL-GEL	...13
SÍNTESIS DE DIPÉPTIDO-OXAZOLIDINONAS Y ESTUDIO DE SUS PROPIEDADES ANTIBACTERIANAS	...14
MECANISMO DE LA RUPTURA DE UN TRIÉSTER DE FOSFATO MEDIANTE UNA CATÁLISIS SUPRAMOLECULAR CON AMIDINIOS Y GUANIDINIOS	...15
FORMACIÓN DE TRIS-ADUCTOS N→B A PARTIR DEL AUTOENSAMBLE DE ÉSTERES BORÓNICOS CON 2,4,6-TRI-(4-PIRIDIL)- 1,3,5-TRIAZINA Y ESTUDIO SUPRAMOLECULAR DE LA INCLUSIÓN DE SISTEMAS POLIAROMÁTICOS EN ESTADO SÓLIDO	...16
REDES SUPRAMOLECULARES Y PROPIEDADES FOTOFÍSICAS EN COMPLEJOS HETEROLÉPTICOS DE Cu(I)	...17
DESARROLLO DE POLÍMEROS DONADOR-ACEPTOR Y SU APLICACIÓN EN DISPOSITIVOS FOTOVOLTAICOS ORGÁNICOS	...18
EL EFECTO DE LOS SUSTITUYENTES EN LA POSICIÓN 3 DE ESTADORES ESTEROIDALES	...19
OBTENCIÓN Y CARACTERIZACIÓN DE UNA SAL DE R-BACLOFENO CON ÁCIDO MÁLICO	...20
DISEÑO Y SÍNTESIS DE ANÁLOGOS DE LINEZÓLIDA TIPO DIPÉPTIDO BASADOS EN INTERACCIONES SUPRAMOLECULARES	...21
ANÁLISIS ESTRUCTURAL DE DERIVADOS DEL ÁCIDO 3- AMINOFENILBORÓNICO	...22

LIBERACIÓN CONTROLADA DE FÁRMACOS DE NANOPARTÍCULAS MCM-41 RECUBIERTAS CON POLI(β-AMINO ESTER) SENSIBLE A pH

William Talavera-Pech^a, Patricia Quintana-Owen^b, Adriana Esparza-Ruiz^c y Alejandro Ávila-Ortega^c

^a Centro de Investigación en Corrosión, Universidad Autónoma de Campeche, San Francisco de Campeche, México.

^b Centro de Investigación y Estudios Avanzados Campus-Mérida, Mérida, México. ^c Facultad de Ingeniería Química, Universidad Autónoma de Yucatán, Mérida, México. watalave@uacam.mx

Introducción

La elevada área superficial, morfología ajustable, biocompatibilidad y facilidad de funcionalización son características únicas de las nanopartículas mesoporosas de silicio (MSNs) tipo MCM-41.¹ Por su parte los poli(β-amino ester) (PbAE) son polímeros biocompatibles y biodegradables que tienen la característica de que a pH fisiológico (pH = 7.4) se encuentran sólidos y estables, mientras que a valores de pH más bajos (pH < 6.5) se disuelven.² Tomando en cuenta las características de ambos materiales, al unirlos podrían ser utilizados para la encapsulación y el control de la liberación de fármacos en ambientes cancerígenos, pues éstos presentan valores de pH entre 5 y 6.5. Por lo tanto, en esta investigación se recubrieron MSNs con PbAE (PbAE-MSNs), mediante un nuevo método de síntesis que involucra la reacción de un PbAE con grupos acrilato terminales y grupos amino injertados en las MSNs, después se encapsuló el fármaco modelo Doxiciclina (DXY) en el sistema, para posteriormente estudiar su liberación en medio fisiológico y ácido.

Resultados y discusión

En la Figura 1a se muestra una micrografía TEM de las MSNs-PbAE, en la que se puede observar que las MSNs presentan un recubrimiento tipo anillo amorfo, atribuido previamente en la literatura a material orgánico polimérico.³ La inserción de polímero se confirma con la aparición de bandas características de grupos metilo (CH₂), carbonilo (C=O) y acrilato (C=C, =C-H) para los MSNs-PbAE (Figura 1b)

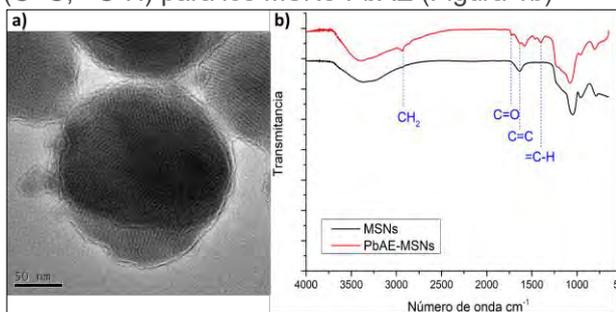


Figura 1

En la Figura 2 se presentan los perfiles de liberación de DXY. Se observó que las MSNs sin recubrimiento polimérico tienen liberaciones similares entre ambos

valores de pH, lo que sugiere que no existe ningún tipo de control; mientras que para las muestras PbAE-MSNs se obtuvo una liberación a pH 5.5 aproximadamente 40% superior que a pH 7.4, demostrando que la presencia de PbAE en el sistema es fundamental para el control de la liberación.

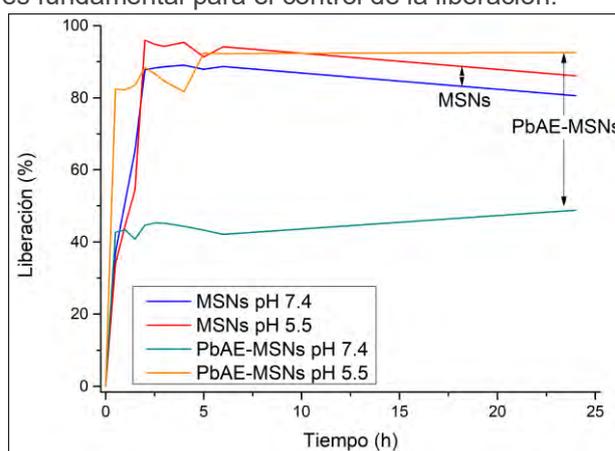


Figura 2

Conclusiones

Las MSNs fueron recubiertas satisfactoriamente con PbAE, sin afectar su morfología y aumentando el contenido de grupos orgánicos en su superficie, según lo observado por TEM y FTIR. El fármaco modelo DXY puede ser encapsulado en las PbAE-MSNs y por último los estudios de liberación demuestran que el recubrimiento polimérico en las MSNs es capaz de controlar que la liberación de DXY se presente preferentemente en medio ácido

Referencias

1. Yang, K.-N.; Zhang, C.-Q.; Wang, W.; Wang, P. C.; Zhou, J.-P.; Liang, X.-J. pH-Responsive Mesoporous Silica Nanoparticles Employed in Controlled Drug Delivery Systems for Cancer Treatment. *Cancer Biol. Med.* 2014, 11 (1), 34–43.
2. Huynh, C. T.; Nguyen, M. K.; Kim, J. H.; Kang, S. W.; Kim, B. S.; Lee, D. S. Sustained Delivery of Doxorubicin Using Biodegradable pH/temperature-Sensitive Poly(ethylene Glycol)-Poly(β-Amino Ester Urethane) Multiblock Copolymer Hydrogels. *Soft Matter* 2011, 7 (10), 4974.
3. Chung, P. W.; Kumar, R.; Pruski, M.; Lin, V. S. Y. Temperature Responsive Solution Partition of Organic-Inorganic Hybrid poly(N-Isopropylacrylamide)-Coated Mesoporous Silica Nanospheres. *Adv. Funct. Mater.* 2008, 18 (9), 1390–1398.

SÍNTESIS DE NAFTALENDIIMIDAS NUEVAS Y ESTUDIO DE SUS PROPIEDADES ÓPTICAS PARA LA DETERMINACIÓN DE CATIONES

Christian Leonardo Castro Riquelme^a, Adrián Ochoa Terán^a y Edgar Alonso Reynoso Soto^a

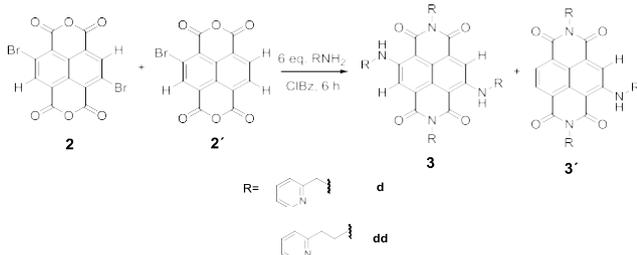
Laboratorio de Química Supramolecular, Instituto Nacional de México/Instituto Tecnológico de Tijuana^a, Tijuana, México ochoa@tectijuana.mx

Introducción

En la actualidad es necesaria la obtención de compuestos con propiedades ópticas y electroquímicas que puedan ser aprovechados para aplicaciones diversas y que no sean contaminantes para el ambiente, además de ser biocompatibles, estables química, fotoquímica y térmicamente. Un tipo potencial son las NDIs ya que poseen estas propiedades y han sido utilizadas con éxito como sensores, colorantes, intercaladores de ADN y semiconductores.

Resultados y discusión

Las NDIs sintetizadas fueron obtenidas con rendimientos que van desde 44 al 89 % utilizando como material de partida el anhídrido **2** monobromado y dibromado (Esquema 1).¹



Esquema 1. Reacción general para la síntesis de NDIs.

Las NDIs sintetizadas presentaron fluorescencia y bandas de absorción características en el intervalo de 450 a 650 nm correspondiente a la región del espectro visible, dependiendo del número de sustituyentes. Los coeficientes de absorptividad molar (ϵ) de las NDIs son desde 8692 a 19401 Lmol⁻¹cm⁻¹, siendo candidatos viables para su aplicación como sensores colorimétricos o fluorescentes.

Se realizaron titulaciones de las NDIs con metales de transición distintos, **3dd** mostró sensibilidad alta hacia los iones de Cu²⁺ resultando en el abatimiento de la fluorescencia por la posible formación de un complejo metal-ligando 1:1 (Figura 1). La NDI **3dd** mostró cambios en su espectro de absorción en presencia de Cu²⁺ abatiéndose la señal

a 530 nm y formándose una nueva a 635 nm, presentando cambios en la coloración de la solución solamente en presencia de cobre (Figura 2).

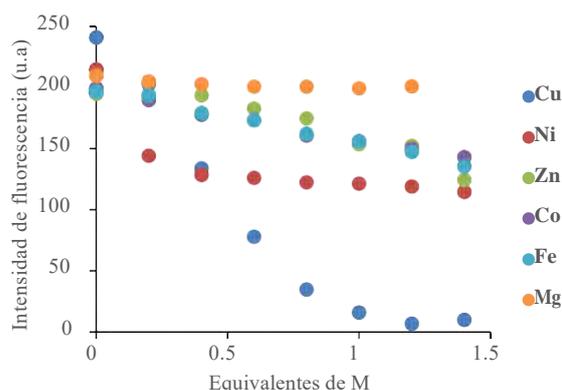


Figura 1. Titulación de **3dd** con distintos metales (M²⁺).

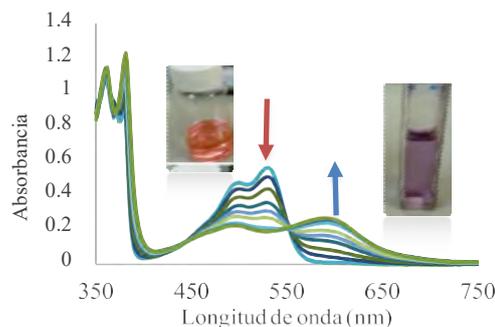


Figura 2. Cambios en el espectro de absorción de **3dd** al realizarse adiciones de Cu²⁺.

Conclusiones

Las NDIs sintetizadas con sustituyentes de tipo piridina (**3d** y **3dd**) mostraron sensibilidad alta hacia iones Cu²⁺ debido a la posible formación de complejos, mostrando su viabilidad como sensor fluorescente o colorimétrico de Cu.

1. Roshan, F.; Zhenghao, M.; Evan, M.; Fei, Ruan; Sauv , G. J. *Phys. Chem.* **2014**, *118*, 3433–3442

2.-Doria, F.; Amendola, F.; Grande, V.; Bergamaschi, G.; Freccero, M. *Sens. Actuators, B* **2015**, *212*, 137-144.

SÍNTESIS Y ANÁLISIS ESTRUCTURAL DE COMPUESTOS PENTACOORDINADOS DE DIORGANOESTAÑO (IV) DERIVADOS DE 3-AMINO-2-NAFTOL

Arturo González Hernández^a y Víctor Barba López^a

^a Centro de Investigaciones Químicas (CIQ), IICBA, UAEM

arturo.gonzalezher@uaem.mx, vbarba@uaem.mx

Introducción

Los compuestos de estaño(IV) derivados de bases de Schiff presentan una gran variedad de interesantes posibilidades estructurales.

El interés en sintetizar este tipo de compuestos es debido a las diferentes actividades biológicas que presentan como son: antimicrobianos, anti-inflamatorios, bactericidas, anti-fúngicos y citotóxicos. Debido a lo antes mencionado, nuestro objetivo principal es la generación de complejos de estaño (IV) derivados de bases de Schiff multidentadas debido a que la presencia de varios sitios de coordinación con la geometría adecuada permitirá la preparación de complejos de estaño(IV).¹

El presente trabajo describe la síntesis de dieciocho compuestos y su análisis estructural. Se obtuvieron a partir de salicilaldehidos sustituidos con 2-amino-3-naftol y óxidos de di-organoestaño como se muestra en la Figura 1.

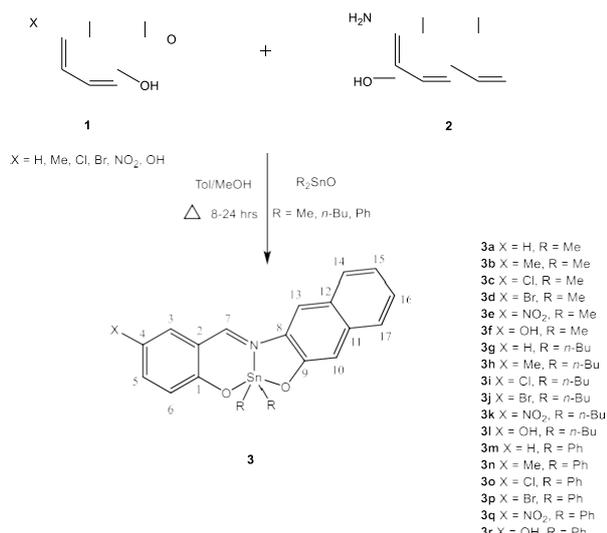


Figura 1. Síntesis de los compuestos pentacoordinados de estaño(IV)

Resultados y discusión

Los datos de resonancia magnética nuclear de ¹H para los compuestos **3a-3r** presentan una señal simple entre 8.89-8.57 ppm la cual corresponde a los hidrógenos del grupo azometino (HC=N), estos valores son similares a los encontrados en otros compuestos organoestaño(IV) derivados de ligantes con átomos donadores ONO. La existencia de especies pentacoordinadas de estaño(IV) puede ser

demostrada por resonancia magnética nuclear de ¹¹⁹Sn en la cual se observan señales simples entre -141.7 a -326.6 ppm para los derivados de diorganoestaño **3a-3r** los valores están de acuerdo a lo reportado en la literatura.^{2,3}

Para los complejos **3c**, **3d**, **3g**, **3k**, **3l** y **3n-r** se obtuvieron cristales adecuados para su estudio por difracción de rayos X de monocristal, observándose compuestos pentacoordinados con geometría bipirámide trigonal distorsionada. Por ejemplo, el análisis estructural del compuesto **3c** permite la formación de interacciones intermoleculares Sn...O con un valor de 2.643 Å, así como de interacciones C-H...O e interacciones ... con valores 2.535 Å y 3.728 Å respectivamente para dar lugar a un arreglo supramolecular de un polímero de coordinación en 3D (Figura 2).

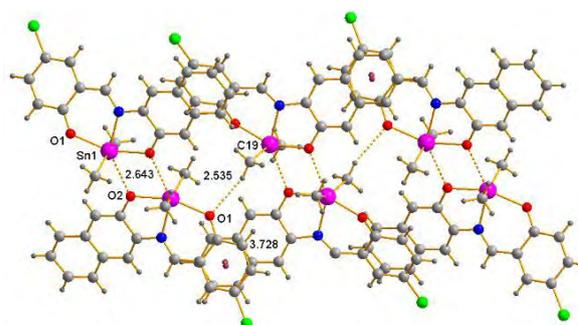


Figura 2. Interacciones intermoleculares encontradas en el compuesto **3c**

Conclusiones

Se sintetizaron y caracterizaron dieciocho complejos mononucleares de diorganoestaño(IV), derivados de átomos donadores ONO. En solución, los átomos de estaño presentan una geometría de bipirámide trigonal distorsionada mientras que, en el estado sólido se observan en algunos casos geometrías octaédricas distorsionadas. El análisis estructural muestra la formación de arreglos supramoleculares a través de interacciones secundarias.

Referencias

- [1] V. Barba, E. Vega, R. Luna, H. Höpfl, H. I. Beltrán, L. S. Zamudio-Rivera. *J. Organomet. Chem.* **2007**, 692, 731.
- [2] J. M. Rivera, H. Reyes, A. Cortes, R. Santillan, P. G. Lacroix, C. Lepetit, K. Nakatani, N. Farfán. *Chem. Matter.* **2006**, 18, 1174.
- [3] V. Barba, J. Zaragoza, H. Höpfl, N. Farfán, H.I. Beltran, L. S. Zamudio-Rivera. *J. Organomet. Chem.* **2011**, 696, 1949.

SINTESIS y FOTOLUMINISCENCIA DE COMPLEJOS DE Eu(III) COORDINADOS AL LIGANTE TPTZ INMERSOS EN MATRICES DE POLIMETILMETACRILATO

Ch. J. Salas-Juárez^a, R. E. Navarro^a, R. Aceves^b

^aDepartamento de Investigación en Polímeros y Materiales, ^bDepartamento de Investigación en Física, Universidad de Sonora, Hermosillo, Sonora 83190 México. chjsalasjuarez@gmail.com

Introducción

Actualmente, los complejos de lantánidos en el campo de la química de coordinación atraen considerablemente la atención por sus propiedades fotoluminiscentes^{1,2}, así como sus potenciales aplicaciones como dispositivos optoelectrónicos³. Sin embargo, los iones lantánidos (Ln³⁺) presentan baja absorción molar debido a la presencia de transiciones 4f-4f, así que la formación de complejos de coordinación con metales Ln³⁺ mejora la sensibilización por medio de transferencia de energía entre ligante-metal mediante el fenómeno denominado "antena". Por otra parte, los complejos de coordinación soportados en matrices poliméricas son una clase de materiales híbridos denominados metalopolímeros⁴, que han recibido la atención en los últimos años debido a sus interesantes propiedades fisicoquímicas, en las que destacan su flexibilidad, propiedades mecánicas, además de un bajo costo de producción⁵. En este trabajo se presentan los resultados obtenidos de complejos de Eu coordinados al ligante 2,4,6-tri(2-piridil)-s-triazina (EuTPTZ), soportados en una matriz polimérica de polimetilmetacrilato (PMMA), así como su caracterización mediante espectroscopia de infrarrojo (IR), análisis termogravimétrico (TGA), transmitancia y fotoluminiscencia.

Resultados y discusión

El complejo de EuTPTZ se obtuvo en forma de polvo en relación estequiométrica 1:1. Se caracterizó mediante espectroscopia de IR. En el espectro se observa un desplazamiento de la señal correspondiente a las vibraciones C=N de los anillos de piridina y triazina del ligante TPTZ a mayor número de onda, 1368 cm⁻¹. También se muestra un desplazamiento de la vibración C=N y C=C del anillo de piridina localizado a 1520 cm⁻¹ a mayor número de onda, lo que indica la formación del complejo. Se obtuvieron películas de PMMA con diferentes concentraciones de EuTPTZ, partiendo de una solución al 1% en peso de PMMA/EuTPTZ en DMF hasta 0.0625%. Las películas se caracterizaron mediante transmitancia, donde las muestras con 0.125% y 0.0625% de EuTPTZ (p/p) presentan una

transparencia similar a la película pura de PMMA (aproximadamente 92% en el visible).

El complejo de EuTPTZ y las películas de PMMA/EuTPTZ se analizaron mediante TGA. La película de PMMA muestra una sola caída de degradación a 268 °C, mientras que las películas de PMMA/EuTPTZ presentan dos caídas de degradación a 268 °C y 340 °C. Esta segunda caída es posible asociarse a la incorporación del complejo de EuTPTZ, que este presenta dos caídas de degradación una 361 °C y otra a 435 °C, sin llegar a la degradación total a una temperatura de 700 °C.

Las películas de PMMA/EuTPTZ que presentan transparencia (0.125% y 0.0625%) se caracterizaron mediante fotoluminiscencia, donde se observan las emisiones características de Eu(III) (⁵D₀ – ⁷F_J, J=0-4) localizadas a 579, 590, 615, 649 y 689 nm al ser excitadas a 310 nm. Los resultados sugieren un efecto de transferencia de energía ligante-metal.

Conclusiones

La formación de complejos entre ligante-Eu se demostró mediante el desplazamiento a mayores números de onda de las vibraciones de C=N del anillo de piridina mediante espectroscopia infrarroja, además de la transferencia energía mostrada entre ligante-metal en los espectros de emisión luminiscente.

Se obtuvieron películas de PMMA-EuTPTZ transparentes a una concentración 0.125% y 0.0625% p/p PMMA/EuTPTZ. Las películas de PMMA/EuTPTZ muestran una fuerte emisión monocromática en el rojo. Los resultados indican que es posible la generación de materiales híbridos para el desarrollo de dispositivos emisores de luz.

Referencias

1. Bortoluzzi, M., Paolucci, G., Gatto, M., Roppa, S., Enrichi, F., Ciorba, S. and Richards, B. (2012). Journal of Luminescence, 132(9), pp.2378-2384.
2. Wang, A., Zhou, D., Chen, Y., Li, J., Zhang, H., Zhao, Y. and Chu, H. (2016). Journal of Luminescence, 177, pp.22-30.
3. Forster, P., Parra, D., Lugao, A., Kai, J. and Brito, H. (2015). Journal of Luminescence, 167, pp.85-90.
4. He, Y., Liu, L., Fu, G., Lü, X., Wong, W. and Jones, R. (2016). Inorganic Chemistry Communications, 72, pp.62-64.
5. Chen, W., Fan, R., Zhang, H., Dong, Y., Wang, P. and Yang, Y. (2017). Dalton Transactions, 46(13), pp.4265-4277.

SÍNTESIS DE NUEVOS QUIMIOSENSORES FLUORESCENTES

Melchor Solís Santos^a, Mario Ordóñez Palacios^{a*} y Adrián Ochoa Terán^b

^aCentro de Investigaciones Químicas - IICBA, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Av. Universidad 1001, 62209 Cuernavaca, Morelos, México. ^bCentro de Graduados e Investigación en Química, Tecnológico de Tijuana, Av. Castillo de Chapultepec, Fracc. Tomás Aquino, Tijuana, Baja California.

^aCentro de Investigaciones Químicas-IICBA, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Cuernavaca, Morelos, México; ^bCentro de Graduado e Investigación en Química, Tecnológico de Tijuana, Tijuana, Baja California, México. melchor.soliss@uaem.edu.mx; palacios@uaem.mx; ochoa@tectijuana.mx

Introducción

Las isoindolinas, isoindolin-1-onas (2,3-dihidro-1H-isoindol-1-onas) y ftalimidias (isoindolin-1,3-dionas), constituyen una clase interesante de compuestos orgánicos debido a sus atractivas propiedades farmacológicas. Por ejemplo, el indoprofeno y talidomida (Figura 1) muestran actividad antiinflamatoria, antitumoral, antibacteriana y antihipertensiva.¹

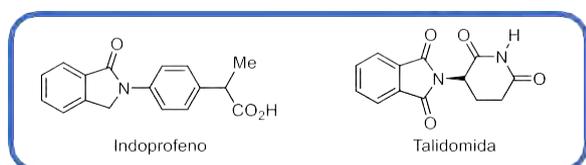


Figura 1. Indoprofeno y Talidomida

Además, las isoindolinas, isoindolin-1-onas y ftalimidias se utilizan como intermediarios en la síntesis de compuestos bioactivos más complejos, que no solo pueden ser utilizados como fármacos, sino que también pueden actuar como sensores o biomarcadores.² Con base en lo anterior, se han desarrollado diferentes métodos para la preparación de estos heterociclos; sin embargo, algunos de estos métodos sufren inconvenientes, incluyendo tiempos largos de reacción, altas temperaturas, rendimientos insatisfactorios y el uso de reactivos caros y/o tóxicos.

Resultados y discusión

De acuerdo con la creciente necesidad en el desarrollo de nuevos métodos para la preparación de compuestos con propiedades farmacológicas, en este trabajo se describen métodos eficientes y sostenibles para la síntesis de isoindolinas, isoindolin-1-onas y ftalimidias (Figura 2).³

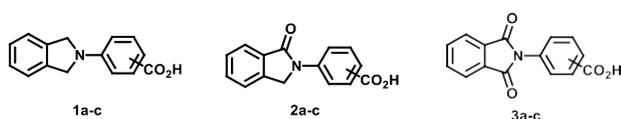


Figura 2. Isoindolinas, Isoindolin-1-onas y Ftalimidias

A los compuestos **1a-c**, **2a-c** y **3a-c** se le determinaron sus propiedades fluorescentes en MeOH, MeCN y H₂O (Figura 3), calculándose también el rendimiento cuántico. La presencia de carbonilos en la molécula y la posición del ácido carboxílico en el anillo aromático influye en la intensidad de la fluorescencia, afectando el rendimiento cuántico.

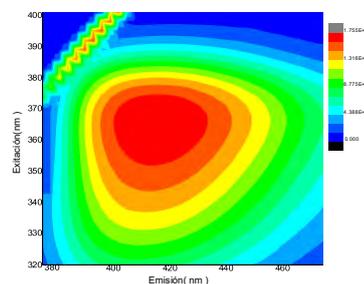


Figura 3. Espectro 2D de la emisión de las isoindolin-1-onas

También se llevó a cabo un estudio de la selectividad de estos compuestos frente a diferentes iones metálicos ²⁺, calculándose las constantes de Stern-Volmer, Observándose una gran afinidad por el ión Cu²⁺ seguida de Hg²⁺.

Conclusiones

Se logró la síntesis eficiente de las isoindolinas, isoindolin-1-onas y ftalimidias, las cuales presentaron excelentes propiedades fluorescentes, así como una alta sensibilidad ante la presencia de ciertos cationes, dejando claro que pueden ser utilizados como quimiosensores.

Referencias

- (a) Ye, X.; Sun, Y.; Chen, Z.; Lu, S. *Med. Chem.* **2016**, *12*, 613-620. (b) Breytenbach, J. C.; van Dyk, S.; van den Heever, I.; Allin, S.; Hodgkinson, C. C.; Northfield, C. J.; Page, M. I. *Bioorg. Med. Chem. Lett.* **2000**, *10*, 1629-1631; (c) Barnes, K. D.; Chen, P.; Chang, Y.; Lewis, R. M.; Mayhew, N. J.; Steffke, S. H.; Wang, G.; Wang, Y.; Yang, Y.-L. A.; Lippert III, J. W. *Synth. Commun.* **2011**, *41*, 67-72.
- Zhang, T. L.; Han, B. H. *Langmuir* **2010**, *26*, 8893-8900.
- (a) Tibhe, G. D.; Bedolla-Medrano, M.; Cativiela, C.; Ordóñez, M. *Synlett* **2012**, *23*, 1931-1936; (b) Hernandez- Fernandez, E.; Ordóñez, M. *Synlett* **2014**, *25*, 1145-1149.

DISEÑO DE MACROCICLOS DERIVADOS DE COMPUESTOS DE ORGANOSILICIO Y ORGANOESTAÑO

Pedro Montes-Tolentino^a, Irán Rojas-León^a y Herbert Höpfl^a

^aCentro de Investigaciones Químicas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Morelos, México.

E-mail: hhopfl@uaem.mx

Introducción

Recientemente existe una oleada creciente en el desarrollo de compuestos macrocíclicos covalentes debido a su amplio potencial en el uso para el almacenamiento de gas, cristales líquidos y catalisis.¹ En nuestro grupo de investigación tenemos antecedentes sólidos sobre el diseño de macrociclos a partir de bloques de construcción con compuestos de organoestaño, organosilicio y ligantes ditiocarbamato.^{2,3} Recientemente hemos buscado desarrollar macrociclos y jaulas basados en tectones di- y trinucleares de organoestaño.

Resultados y discusión

La síntesis del bloque de construcción de organosilicio (**BC1**) se realizó a partir de 4,4'-dibromo-1,1'-bifenilo mediante una reacción con *n*-BuLi seguida de la adición de cloro(clorometil)dimetilsilano, Figura 1. **BC1** se utilizó como compuesto de partida para generar nuevos ligantes con dos grupos amino mediante reacciones S_N2 en condiciones solvotérmicas (**BC2** y **BC3**). Los bloques de construcción fueron caracterizados por RMN multinuclear, espectroscopia de IR y por difracción de rayos-X.

La versatilidad de los bloques de construcción permitieron diseñar macrociclos covalentes (**MC**) a través de reacciones de autoensamble en condiciones solvotérmicas mediante dos rutas: 1) Reacciones S_N2 entre **BC1** y las bis-aminas y 2) Síntesis de macrociclos de estaño dinucleares con 42 miembros entre los bloques **BC2** y **BC3** que fueron convertidos en bis-ditiocarbamatos y R₂SnCl₂ (**MC4- MC7**).

Hasta el momento se ha podido aislar y caracterizar el compuesto **MC2**.

La pérdida de la señal N-H ($\delta = 3.4$ ppm) en los espectros de RMN de ¹H de las aminas secundarias es una evidencia de la formación de los macrociclos. El análisis de espectrometría de masas (FAB⁺) para **MC2** mostró el ion molecular (*m/z* = 804.38) correspondiente a los sistemas de autoensamble [1:1], mostrando selectividad y estabilidad del macrociclo orgánico.

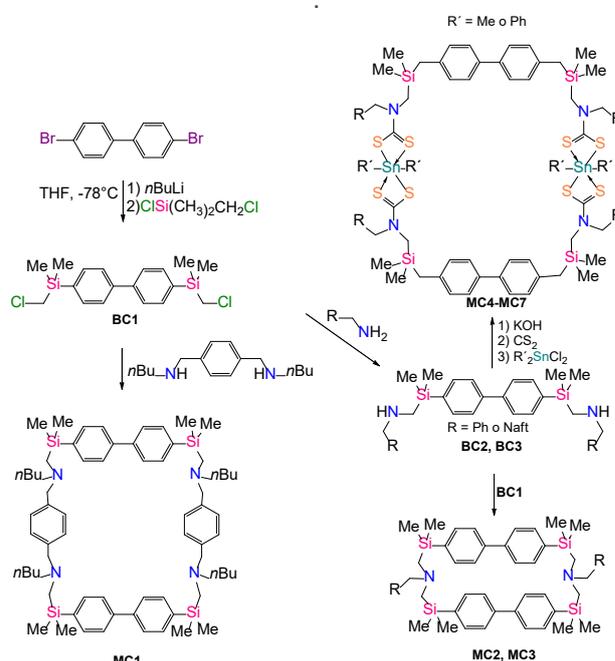


Figura 1. Síntesis de bloques de construcción y macrociclos.

Conclusiones

El compuesto de silicio **BC1** resulta ser una excelente opción para la síntesis de nuevos bloques de construcción (**BC2** y **BC3**). La reacción de **BC1** con **BC2**, **BC3** y bis-aminas permitió formar tres macrociclos (**MC1-MC3**). El presente trabajo sentará las bases para el diseño, la síntesis y la caracterización de cajas moleculares a partir de **BC1** con compuestos de organoestaño trinucleares.

Referencias

- Sheng-Li H., Guo-Xin J., He-Kuan L., Andy-Hor T.S., *Chem. Asian J.*, **2015**, 10, 24-42.
- Vazquez-Ríos M.G., Reyes-Márquez V., Höpfl H., Torres-Huerta A., Guerrero-Álvarez J., Sánchez M., Hernández-Ahuactzi I.F., Ochoa-Lara K., Jiménez-Sánchez A. Santillán R., *Eur. J. Inorg. Chem.*, **2016**, 3429-3440.
- Rojas-León I., Alnasr A., Jurkschat K., Vasquez-Ríos M.G., Hernández-Ahuactzi I.F., Höpfl H., *Chem. Eur. J.*, **2018**, 24, 4547-4551.

Agradecimientos

Se agradece a la SEP-PRODEP por la beca posdoctoral y al CONACYT por el apoyo financiado a través del proyecto de Ciencia Básica 158098 y a la Red Temática de Química Supramolecular (294810).

SÍNTESIS DE NUEVAS PLATAFORMAS DE QUITOSAN-GLUTARALDEÍDO PARA INGENIERÍA DE TEJIDO USANDO BASES DE SCHIFF

Gabriela Martínez-Mejía^a, Mónica Corea Téllez^b y Rogelio Jiménez-Juárez

^a Departamento de Química Orgánica, Escuela Nacional de Ciencias Biológicas, Instituto Politécnico Nacional, Prolongación de Carpio y Plan de Ayala s/n, Miguel Hidalgo, 11340, Ciudad de México, México. rjimenezj@ipn.mx

^b Escuela Superior de Ingeniería Química e Industrias Extractivas, Instituto Politécnico Nacional, San Pedro Zacatenco, Gustavo A. Madero 07738, Ciudad de México, México.

Introducción

Una red reticulada se forma a partir de un hidrogel con polímeros lineales¹, los cuales tienen propiedades físicas como hinchamiento, permeación, resistencia mecánica y sus características superficiales pueden ser moduladas mediante modificación estructural.^{1,2} Los hidrogeles basados en polímeros naturales están recibiendo un gran interés en medicina regenerativa, por su uso como andamios para hacer crecer el tejido celular para reparar y / o regenerar tejido u órganos dañados.^{3,4} El quitosano se usó para la preparación de hidrogeles a través de la reacción de base de Schiff.⁵ El quitosano es un polímero de residuos de glucosamina y N-acetilglucosamina que se obtiene por desacetilación de quitina.^{6,7}

Resultados y discusión

Se obtuvieron 15 hidrogeles, frescos y liofilizados, a partir de ácido acético, de los cuales 5 de cada grupo son presentados en la Figura 2.

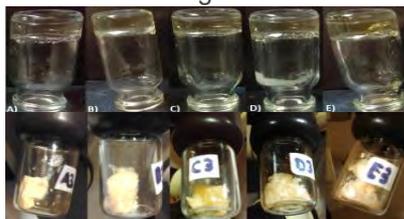


Figura 2. Fotografías de hidrogeles entrecruzados 1 (frescos), 2 (liofilizados) con diferentes concentraciones de agente de entrecruzamiento (Glutaraldehído): A) 2% p, B) 4% p, C) 6 p, D) 8% p y E) 10% p.

La conversión de GA se presenta en la figura 3, se observa que los hidrogeles con menor concentración de GA tienen menores tiempos de reacción, así como una cinética de orden cero.

El análisis de infrarrojo de los hidrogeles se muestra en la figura 4. Los espectros muestran las bandas características de quitosano a 1044, 1074 y 1136 cm^{-1} correspondientes al grupo C-O-C. El grupo funcional imino, característico por el entrecruzamiento se observa a 1635 cm^{-1} .

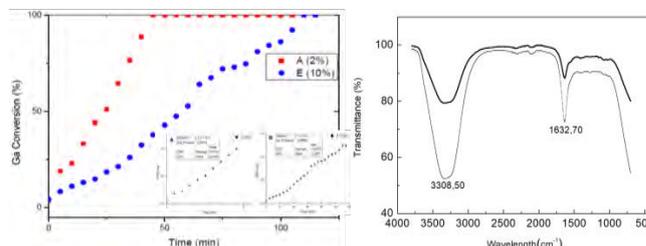


Figura 3 y 4. Conversión de GA, cinética de reacción para los hidrogeles y espectros de FT- IR de hidrogeles de quitosano-glutaraldehído preparados al 2% p. (■) y 10% p. (●) de agente de entrecruzamiento

La Figura 5 muestra los barridos calorimétricos de termogravimetría y análisis por derivada del 2% en peso y el 10% en peso de hidrogeles de GA. La descomposición total se observa alrededor de 160°C.

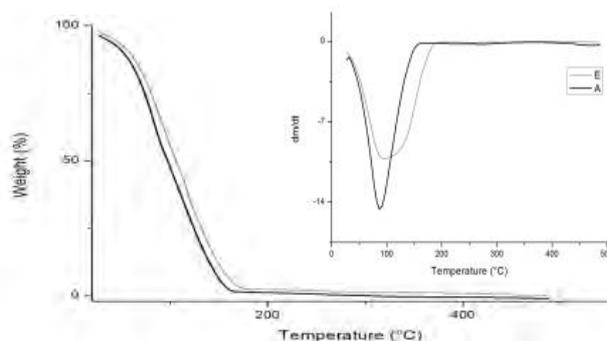


Figura 5. Termograma y AD de hidrogeles entrecruzados al 2% y 10% de glutaraldehído

Conclusiones

Se sintetizaron y caracterizaron 5 nuevos hidrogeles entrecruzados de quitosano-glutaraldehído (2% p., 4% p., 6% p., 8% p. y 10% p.) que presentan potencial aplicación para ingeniería de tejidos.

Referencias

- Desai R, Koshy S, Hilderbrand S, Mooney D, Joshi N. *Versatile click alginate hydrogels crosslinked via tetrazine-nonbornene chemistry*. *Biomater* **2015**; 50: 3037.
- Kumar T., Takhur A., Amit A., et al. *Modified chitosan hydrogels as drug delivery and tissue engineering systems: present status and applications*. *Pharmaceutica*. **2012**; 2: 439-449
- Zeman S. *Regenerative medicine*. *Nature Biotech.* **2001**; 19: 201-206

POLIMERIZACIÓN POR ARILACIÓN DIRECTA DE POLI(3-HEXILTIOFENOS) REGIORREGULARES Y SU APLICACIÓN EN CELDAS SOLARES ORGÁNICAS

M. Rangel-Ayala^a, M. Güizado-Rodríguez^a, V. Barba^b, J. L. Maldonado^c

^aCentro de Investigación en Ingeniería y Ciencias Aplicadas (CIICAp)-IICBA-UAEM, Cuernavaca, México; ^bCentro de Investigaciones Químicas (CIQ)-IICBA-UAEM, Cuernavaca, México; ^cCentro de Investigaciones en Óptica, A.C. (CIO), León, México. marisolguizado@uaem.mx

Introducción

Los polímeros semiconductores son una atractiva alternativa en el campo de la optoelectrónica debido a que permiten fabricar dispositivos ligeros, flexibles, de bajo costo y de procesabilidad escalable.¹ El funcionamiento de las celdas solares orgánicas (CSO) consta de cuatro procesos foto-físicos: (1) absorción de un fotón y generación de un excitón, (2) difusión del excitón (3) disociación del excitón y (4) transporte y colección de carga; para lo cual, la síntesis de polímeros conjugados para la capa activa de las CSO juega un papel determinante; el poli(3-hexiltiofeno) regiorregular (rr-P3HT) es un polímero donador de estructura simple que se caracteriza por ser relativamente estable a condiciones ambientales, altamente cristalino lo cual le concede excelentes propiedades eléctricas, de síntesis sencilla y de bajo costo.² Los métodos clásicos de síntesis son los de Stille, Suzuki, Kumada y Negishi, sin embargo, suelen ser de purificación complicada y generar subproductos tóxicos. La polimerización por arilación directa (DARp) es una propuesta ambientalmente amigable para sintetizar polímeros con las características apropiadas para su aplicación en OSCs con arquitectura de hetero-unión de volumen (BHJ) (Figura 1a).

soxhlet en metanol, acetona, hexano y cloroformo. Los efectos de la cantidad de catalizador, temperatura y tiempo de reacción fueron analizados. Las reacciones se realizaron bajo atmósfera de N₂ con disolventes anhidros. Los polímeros sintetizados fueron caracterizados mediante RMN de ¹H, DSC, TGA, GPC, FT-IR, UV-vis, difracción de rayos X de polvos y voltamperometría cíclica; se aplicaron como polímeros donadores en la capa activa de OSCs con arquitectura de BHJ, empleando PC₇₁BM como aceptor y una configuración de celda vidrio/ITO/PEDOT:PSS/capa activa/PFN/metal de field; la capa activa se caracterizó mediante AFM. El mejor desempeño fotovoltaico se obtuvo con un polímero de bajo contenido de catalizador en la reacción (Figura 1b), un rr-P3HT (94% HT) y de bajo peso molecular (M_n = 5117 Da, PDI = 1.3), con *band gap* de 1.94 eV (HOMO_{cv} = -5.05 eV y LUMO_{cv} = -3.11 eV). Las OSC fueron elaboradas bajo condiciones atmosféricas regulares por la técnica de *spin coating*, consiguiendo una eficiencia de conversión de energía (PCE) máxima de 3.59 % (J_{sc} = 9.84 mA/cm², Voc = 0.65 V, FF = 0.56) (Figura 1c). Los resultados muestran que es posible generar polímeros adecuados para OSC mediante la optimización del método de DARp; otras investigaciones lo avalan, N. S. Gobalasingham, *et al.* estudiaron un rr-P3HT sintetizado por el método de Stille, alcanzando una PCE = 2.86 % en BHJ OSC, obtuvieron desempeños similares con rr-P3HT sintetizado por DARp basados en las condiciones de Fagnou (PCE = 2.99 %) y con una modificación a las condiciones de Ozawa (PCE = 3.38 %).³

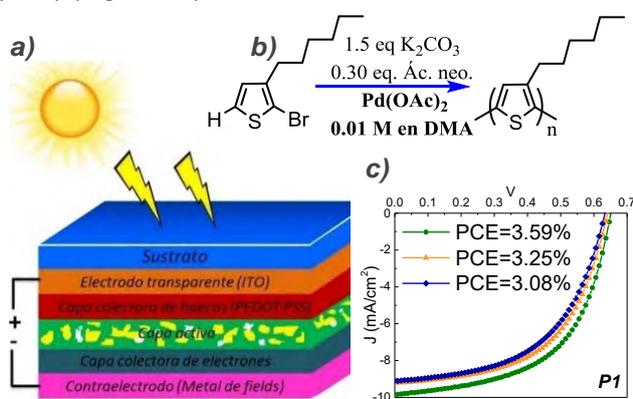


Figura 1. a) OSC con arquitectura BHJ, b) Reacción de síntesis y c) Curvas J-V

Resultados y discusión

Una serie de poli(3-hexiltiofenos) fueron sintetizados mediante DARp y purificados mediante extracción

Conclusiones

Un bajo contenido de catalizador en la síntesis por DARp es determinante para generar rr-P3HTs de bajo PDI y adecuados para formar películas de baja rugosidad para la capa activa de las OSC.

Referencias

1. N. S. Gobalasingham, *et al.* Polym. Chem., vol. 7, pp. 1623-1631, 2016.
2. M. T. Dang, *et al.* Chem. Rev. vol. 113, 3734-3765, 2013
3. N. S. Gobalasingham, *et al.* J. Mater. Chem. A, vol. 5, pp. 14101-14113, 2017.

SÍNTESIS DE COPOLÍMEROS D-A VÍA ARILACIÓN DIRECTA PARA SU APLICACIÓN EN CELDAS SOLARES ORGÁNICAS

Patricia García-Ramírez^a, Marisol Güizado-Rodríguez^a, Víctor Barba^b y José Luis Maldonado^c

^aCentro de Investigación en Ingeniería y Ciencias Aplicadas, CIICAp-IICBA, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Morelos, México; ^bCentro de Investigaciones Químicas, CIQ-IICBA, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Morelos, México. ^cGrupo de Propiedades Ópticas de la Materia, Centro de Investigaciones Ópticas, Guanajuato, México

correo: marisolguizado@uaem.mx

Introducción

Las Celdas Solares Orgánicas (CSO) son una alternativa para disminuir los costos de fabricación, de producción masiva y de mínima generación de residuos tóxicos por las celdas inorgánicas, además de que estos dispositivos son flexibles, de peso ligero, y su aplicación es de bajo costo.¹ Las CSO basadas en la arquitectura de heterounión de volumen (BHJ), que consiste en la mezcla del donador (polímero) con el aceptor (fullereno) han alcanzado mejores eficiencias debido a que hay una mayor área de contacto entre estos materiales.² La síntesis de copolímeros DONADOR-ACEPTOR, se ve como una estrategia para modificar los orbitales HOMO y LUMO y así disminuir el *band gap*.³ La arilación directa, es una alternativa a las metodologías de Stille y Suzuki, que usan monómeros tóxicos y costosos.⁴ El DPP es muy utilizado, debido a su alta movilidad de cargas, alta solubilidad y su amplia absorción en el espectro solar,⁵ con un adecuado fragmento DONADOR (Figura 1) se pueden obtener polímeros con excelente propiedades para su aplicación en CSO.

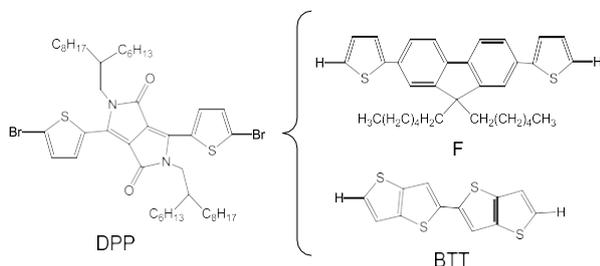


Figura 1. Diversos copolímeros D-A basados en DPP con diferente fragmento DONADOR.

Resultados y discusión

En este trabajo se presenta la síntesis de polímeros vía arilación directa, donde se usó el DPP como ACEPTOR con diferentes fragmentos DONADORES, fluoreno (F), bistienotiofeno (BTT), se llevó a cabo la caracterización fisicoquímica

mediante las técnicas: RMN de ¹H, FT-IR, DSC-TGA, GPC, UV-vis, CV y AFM. La evaluación de las celdas solares realizó con una arquitectura de BHJ, (Figura 2)

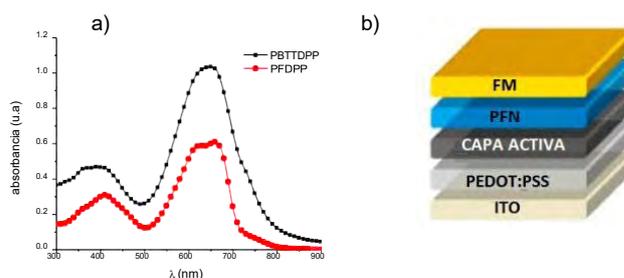


Figura 2. a) Espectros de absorción en solución (CB) y b) Arquitectura BHJ de una CSO.

En la Tabla 1 se muestran las bandas de absorción y el *band gap* de los polímeros, donde se observa que el polímero basado en el fluoreno presenta una banda de absorción más desplazada hacia el rojo con un menor *band gap*, y de esta manera favorece su aplicación en CSO.

Tabla 1

P	λ (nm)	band gap (eV)	Voc (V)	Jsc (mA/cm ²)	PCE (%)
PF-DPP	410, 623, 663	1.82	0.83	1.73	0.50
PBTT-DPP	396, 650	1.85	0.8	0.78	0.32

Conclusiones

Los copolímeros D-A sintetizados, presentaron propiedades fisicoquímicas y ópticas adecuadas para su aplicación en CSO, la capa activa tuvo una adecuada morfología, mejorando el PCE.

Referencias 1. Barbosa O. *et al.*, Acta Universitaria, 2012, 22,36-48. 2. Li W., *et al.*, Acc. Chem. Res, 2016, 49, 78-85. 3. Xu T., Yu L., Mat. Today, 2014, 17, 11-15. 4. P., *et al.*, Chem. Rev. 2016,116, 14225. 5. Jhuo H., *et al.*, J. Chin. Chem. Soc., 2013, 61,115-126.

FORMACIÓN DE ENSAMBLES DISCRETOS A PARTIR DE BLOQUES METÁLICOS DI- Y TRINUCLEARES

Irán Rojas León^{a, b}, Hazem Alnasr^b, Klaus Jurkschat,^b Herbert Höpfl^a

^aCentro de Investigaciones Químicas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Cuernavaca México; ^bLehrstuhl für Anorganische Chemie II, Fakultät für Chemie und Chemische Biologie, Technische Universität Dortmund, Dortmund, Alemania

E-mail: iramrlc@uaem.mx, hhopfl@uaem.mx, klaus.jurkschat@tu-dortmund.de

Introducción

Los ligantes carboxilato son idóneos para la formación de estructuras poliméricas y especies discretas en combinación con metales.¹ Entre grupos organoestaño y diferentes ácidos carboxílicos se ha reportado la formación de estructuras discretas, en las cuales el átomo de estaño se encuentra hexacoordinado con geometría de coordinación de bipirámide trapezoidal.²

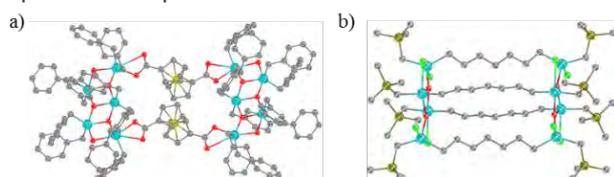


Figura 1. Ejemplos representativos de estructuras oligonucleares derivados de compuestos organoestaño: a) macrociclo y b) jaula.

Resultados y discusión

Se sintetizaron bloques dinuclear y trinucleares de organoestaño y la formación de los bloques se confirmó por medio de difracción de rayos X de monocristal. Para el bloque trinuclear se observa en la red cristalina que las moléculas se apilan con interacciones Sn...Cl con distancias: Sn1...Cl1 3.767 Å, Sn2...Cl2 3.753 Å y Sn3...Cl3 3.748 Å, como se muestra en el fragmento dimérico en la Figura 2d. Se observa la formación de un prisma trigonal, teniendo en las aristas los átomos de cloro y en los vértices los átomos de estaño.

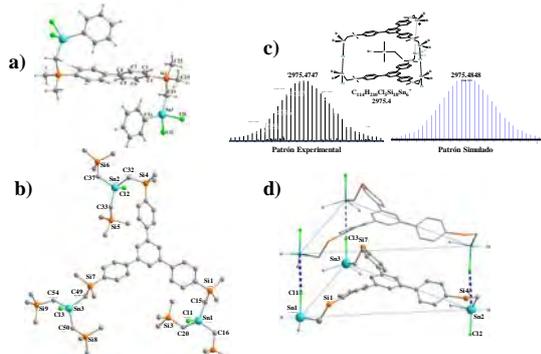


Figura 2. Estructuras moleculares del bloque dinuclear y trinuclear de estaño.

Comparado el patrón isotópico experimental y teórico se deduce la formación de este dímero con un pico en 2975 m/z tras la pérdida de un átomo de cloro [2M-Cl]⁺. La formación del dímero anterior con el bloque trinuclear y la formación de estanoxanos reportados por Jurkschat nos llevó a la formación de estructuras tipo caja con dicarboxilatos como ligantes y la formación de estructuras tipo escalera, como se muestran en la Figura 2.

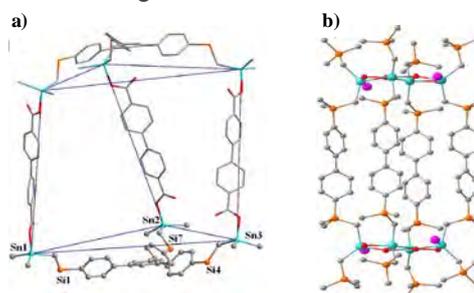


Figura 2. Estructuras discretas derivadas del bloque trinuclear y dinuclear.

La estructura tipo caja (Figura 2a) fue analizada por espectroscopia de RMN, DOSY, espectrometría de masas y por cálculos teóricos (DFT). La estructura tipo jaula (Figura 2b) fue analizada por difracción de rayos X de monocristal.

Conclusiones

Al emplear bloques dinucleares de estaño se logra la formación de jaulas formando unidades de tetraestanoxano. Cuando se utilizan bloques trinucleares y dicarboxilatos se obtienen ensambles tipo caja en forma de prisma triangular.

Referencias

- (a) R. G. Zarracino, J. R. Quiñones, H. Höpfl, *Inorg. Chem.* **2003**, *42*, 3835. (b) V. Chandrasekhar, R. Thirumoorthi, *Organometallics*, **2007**, *26*, 5415. (c) G-L Zheng, J-F. Ma, Z-M. Su, L-K. Yan, J. Yang, Y-Y. Li, J-F. Liu, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2004**, *43*, 2409.
- (a) G-L. Zheng, J-F. Ma, J. Yang, Y-Y. Li, X-R. Hao, *Chem. Eur. J.* **2004**, *10*, 3761-3768. (b) M. Mehring, I. Paulus, B. Zobel, M. Schürmann, K. Jurkschat, A. Duthie, D. Dakternieks, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2001**, 153-160.

Agradecimientos

Se le agradece al CONACyT (proyecto de ciencia básica 158098 y 229929, No. De becario 241473) y a la red temática de química supramolecular (294810) por el apoyo económico.

TEACHING BORONIC ESTERS NEW TRICKS: TEMPLATES OF [2+2]-PHOTOCYCLOADDITIONS OF OLEFINS IN THE SOLID STATE

Gonzalo Campillo-Alvarado^a, Kyle D'Mello^a, Herbert Höpfl^b, Hugo Morales-Rojas^b and Leonard R. MacGillivray^{*,a}

^aDepartment of Chemistry, University of Iowa, Iowa City, IA, 52242, USA; ^bCentro de Investigaciones Químicas, Instituto de Investigación en Ciencias Básicas y Aplicadas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Av. Universidad 1001, Col. Chamilpa CP 62209, Cuernavaca, Morelos, Mexico. len-macgillivray@uiowa.edu

Introduction

Organoboron compounds are among the most versatile and valuable reagents in organic chemistry.¹ Within this class of molecules, boronic esters have attracted broad attention in the field of supramolecular chemistry owing to the ability to participate in reversible covalent and non-covalent interactions. As such, organoboron compounds offer a broad window of opportunities to modulate and control the supramolecular architectures and properties of solids.²

In this contribution, I will discuss our efforts to develop strategies to direct [2+2]-photocycloadditions³ of stilbazoles in the solid state using boronic esters as templates *via* N→B interactions (Figure 1).

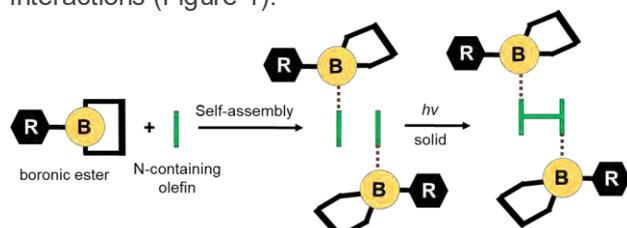


Figure 1. Strategy to enable solid-state reactivity of stilbazole using N→B interactions.

Results and discussion

We demonstrate the T-shaped geometry adopted by coordination of the unsymmetrical monopyridine **4-sbz** to the catechol ester of phenylboronic acid **1** in **(1)·(4-sbz)** to support dimeric face-to-face and head-to-tail (ht) π -stacking of the alkenes (Figure 2a). The C=C bond of **4-sbz** engages in N→B coordination with **1**. Specifically, when a crystalline powder of **(1)·(4-sbz)** was exposed to broadband UV, a ¹H NMR analysis revealed the alkene reacted regioselectively and in quantitative yield (Figure 2b).

Single crystal X-ray diffraction techniques revealed the photoproduct **2(1)·(ht-ppcb)** to act as a host for aromatic molecules in the solid state upon recrystallization. Figure 3 shows the crystal structure of **2(1)·(ht-ppcb)** highlighting the pockets filled by

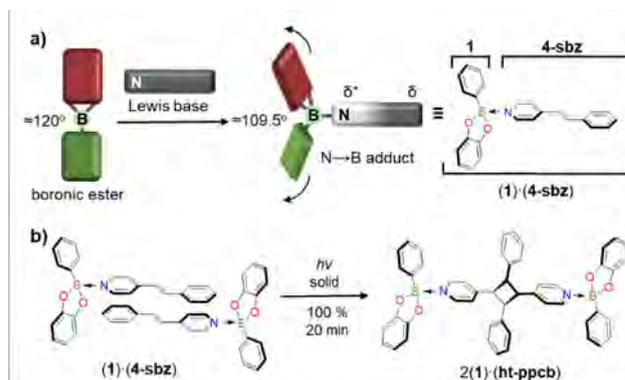


Figure 2. Generation of ditopic boron tweezers from monotopic adducts.

aromatic molecules through π -stacking and C–H \cdots π interactions (Figure 3).

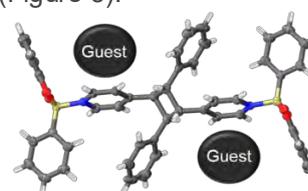


Figure 3. Crystal structure of **2(1)·(ht-ppcb)** highlighting the pockets occupied by aromatic guests.

Conclusion

In summary, we report the first example of a N→B dative bond that directs the formation of a ditopic boronic ester adduct from a monotopic system in the solid state.

References

- Nishiyabu, R.; Kubo, Y.; James, T. D.; Fossey, J. S., Boronic acid building blocks: tools for self assembly. *Chem. Commun.* **2011**, 47 (4), 1124.
- Campillo-Alvarado, G.; Vargas-Olvera, E. C.; Höpfl, H.; Herrera-España, A. D.; Sánchez-Guadarrama, O.; Morales-Rojas, H.; MacGillivray, L. R.; Rodríguez-Molina, B.; Farfán, N., Self-Assembly of Fluorinated Boronic Esters and 4,4'-Bipyridine into 2:1 N→B Adducts and Inclusion of Aromatic Guest Molecules in the Solid State: Application for the Separation of o,m,p-Xylene. *Cryst. Growth Des.* **2018**, 18 (5), 2726.
- MacGillivray, L. R.; Reid, J. L.; Ripmeester, J. A., Supramolecular Control of Reactivity in the Solid State Using Linear Molecular Templates. *J. Am. Chem. Soc.* **2000**, 122 (32), 7817.

ESTUDIOS DE INTERACCIÓN DE DITIOCARBAMATOS DE DIORGANOESTAÑO (IV) DERIVADOS DE BISNAFTALENDIIMIDA CON IONES ACETATO, FLUORURO Y DIHIDRÓGENOFOSFATO

Carolina Godoy-Alcántar^a, Nadia A. Rodríguez-Uribe^a, Miguel A. Claudio-Catalán^b, Felipe Medrano^c y Hugo Tlahuext^a

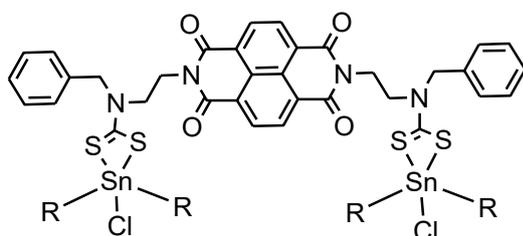
^aCentro de Investigaciones Químicas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Cuernavaca, Morelos, Mexico, ^bDepartamento de Ciencias Químico Biológicas, Universidad Autónoma de Chihuahua, Ciudad Juárez, Chihuahua, México, ^cDepartamento de Ciencias Químico Biológicas, Universidad de Sonora, Sonora, México. *cga@uaem.mx*

Introducción

Actualmente, hay un gran interés en el diseño de receptores capaces de interactuar selectivamente con moléculas iónicas o neutras. En los últimos años hemos estado interesados en la preparación de complejos de ditiocarbamatos de clordiorganoestaño(IV)¹ y en su estudio como potenciales quimiorreceptores. En trabajos previos encontramos que la adición de aniones a los complejos de clordiorganoestaño(IV) resultan en el desplazamiento del cloruro y del fragmento de ditiocarbamato por la ruptura de los enlaces Cl-Sn y S-Sn².

Resultados y discusión

En este trabajo, se reportan tres nuevos ditiocarbamatos de clordiorganoestaño derivados de bisnaftalenimida (Esquema 1) para los cuales se estudia su interacción con F⁻, H₂PO₄⁻ y AcO⁻ en CHCl₃ por titulaciones en UV-Vis, fluorescencia y RMN ¹¹⁹Sn. En las titulaciones espectrofotométricas, a altas concentraciones de anión aparecen dos nuevas bandas de absorción, una a 302 nm que muestra la presencia del ditiocarbamato libre y la otra a 254 nm indicativo de una especie hexacoordinada de estaño.



1: R=*n*-Bu, 2: CH₃, 3: R=Ph

Esquema 1

En las titulaciones por RMN de ¹¹⁹Sn observamos el desplazamiento de la señal del estaño

pentacoordinado (-200 ppm) a la especie hexacoordinada a -350 ppm. La Figura 1 muestra la titulación del ditiocarbamato de dibutilestaño (IV) con AcO⁻.

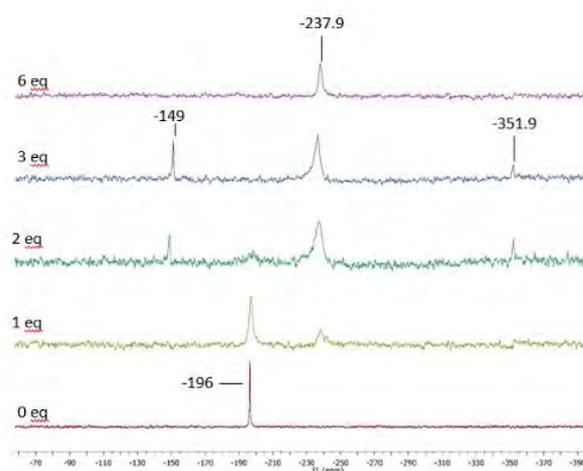


Figura 1

Conclusiones

Se propone un mecanismo en el cual F⁻ y H₂PO₄⁻ promueven el autoensamble de los derivados de ditiocarbamato preparados a una especie hexacoordinada de bisditiocarbamato R₂Sn(dtc)₂. Las especies involucradas en esta transformación se evidencian espectroscópicamente.

Referencias

1. a) Fuentes-Martínez, J.P., Toledo-Martínez, I., Román-Bravo, P., García y García, P., Godoy-Alcántar, C., Lopez-Cardoso, M., Morales-Rojas, H. *Polyhedron*. **2009**, *28*, 3953. b) Tlahuext-Aca, A., Medrano, F., Tlahuext, H., Román-Bravo, P., Godoy-Alcántar, C. *Polyhedron*. **2012**, *33*, 223. c) Castrejón-Antúnez, A., Mendoza-Mendoza, M., Olea-López, D., Medrano, F., Tlahuext, H., Guerrero-Alvarez, J., Vargas-Pineda, G., Godoy-Alcantar, C. *Polyhedron*. **2016**, *111*, 132.
2. Claudio-Catalan, M.A., Medrano, F., Rivera-Marquez, K.I., Rodríguez-Uribe, N.A., Perez-Gonzalez, R. Tlahuext, H., Godoy-Alcantar, C. *Polyhedron*. **2018**, *146*, 55-64.

DISEÑO DE UN BIOMATERIAL BASADO EN LA INMOVILIZACIÓN DE ADN POR LA TÉCNICA DE SOL-GEL

Elani Cabrera Vega^a, Marcela Hurtado Y De la Peña^a y Georgina Alarcón Ángeles^a

^aDepartamento de Sistemas Biológicos, Universidad Autónoma Metropolitana, Ciudad de México, México.
elanijulissa@gmail.com

Introducción

El ácido desoxirribonucleico (ADN) inmovilizado puede emplearse como agente de biorreconocimiento para la identificación de compuestos bioactivos en el área farmacéutica; considerando que el ADN es una diana biológica para muchos antibióticos, antivirales y fármacos antineoplásicos. Así mismo para la evaluación de efectos genotóxicos y carcinogénicos de diversos compuestos.¹ Se han utilizado diferentes métodos de inmovilización de biomoléculas los cuales incluyen: soportes orgánicos, poliméricos o inorgánicos. Sin embargo, muchos de estos métodos no pueden ser aplicados a todas las biomoléculas, pues las interacciones no específicas entre éstas y el material de soporte producen una desnaturalización de la biomolécula afectando su actividad biológica.² Una alternativa para el diseño de biomateriales con ácidos nucleicos es su atrapamiento en matrices inorgánicas de silicatos formadas a bajas temperaturas mediante un método llamado: sol-gel. Este método se basa en reacciones de hidrólisis y condensación consecutivas; ofrece la ventaja de utilizar una fase acuosa a temperaturas bajas y por lo tanto no se compromete la actividad biológica de este tipo de biomoléculas.^{3,4}

Resultados y discusión

En el presente trabajo, se logró la obtención de un biomaterial utilizando esperma de salmón como fuente de ADN, el cual se inmovilizó mediante el método de sol-gel. Este biomaterial presentó afinidad por el sulfóxido de albendazol, el metabolito primario del fármaco albendazol, el cual es causante de efectos embriotóxicos y teratogénicos. La capacidad de retención del biomaterial se evaluó mediante un análisis frontal comparativo entre el sulfóxido de albendazol y un control (cafeína) tanto en geles blanco (sin ADN inmovilizado) y el biomaterial (Figuras 1 y 2). Por otro lado, no se apreció una retención no específica en los geles blancos utilizados.

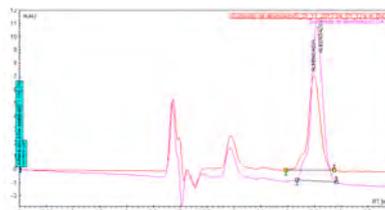


Figura 1. Comparación de cromatogramas de sulfóxido de albendazol en geles blanco y biomaterial.

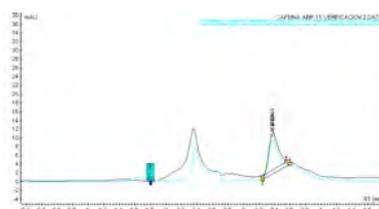


Figura 2. Comparación de cromatogramas de cafeína en geles blanco y biomaterial.

Conclusiones

Se logró diseñar un biomaterial funcional que identificara moléculas con afinidad por el ADN. Se espera que la utilización de este tipo de biomateriales, permita identificar fármacos cuyos patrones de retención por afinidad faciliten la realización de estudios *in vitro* para la detección de interacciones fármaco-ADN, posibles efectos genotóxicos como en el caso de metabolitos teratogénicos, así como de efectos terapéuticos de nuevas moléculas que actúen sobre el ADN como diana biológica

Referencias

1. Su, X.; Hu, L.; Kong, L.; Lei, X.; Zou, H., *J. Chromatogr. A* **2007**, *1154* (1-2), 132-137.
2. Kapusuz, D.; Durucan, C., *J. Mater. Res.* **2013**, *28* (2), 175-184.
3. Walcarius, A.; Collinson, M. M., *Annu. Rev. Anal. Chem.* **2009**, *2* (1), 121-143.
4. Yamada, M.; Nakayama, E., *Mater. Chem. Phys.* **2012**, *133* (1), 278-283.

SÍNTESIS DE DIPÉPTIDO-OXAZOLIDINONAS Y ESTUDIO DE SUS PROPIEDADES ANTIBACTERIANAS

Eleazar Alcántar Zavala^a, Adrián Ochoa Terán^a y Julio Montes Ávila^b

^aLaboratorio de Química Supramolecular, Instituto Tecnológico de Tijuana, Tijuana, B. C., México.

^bLaboratorio de Química de Productos Naturales, Universidad Autónoma de Sinaloa, Culiacán, Sin., México.

ochoa@tectijuana.mx

Introducción

Las oxazolidinonas son una clase nueva de antimicrobianos y linezólida es el primer fármaco de este tipo empleado comercialmente. Es utilizado frente a cepas Gram positivas fármaco-resistentes inhibiendo la síntesis proteica de la bacteria mediante su unión en la subunidad 50s del ribosoma. La inhibición es generada por una interacción supramolecular de enlace de hidrógeno en el sitio de acción. Actualmente se tiene el conocimiento del número grande de bacterias resistentes a medicamentos convirtiéndose en un problema de salud pública, donde linezólida no es la excepción. En este sentido, se planteó la síntesis de oxazolidinonas mediante la modificación química de L-alanina, a través de una ruta diastereoselectiva, seguido de la funcionalización mediante enlaces de tipo peptídico con aminoácidos diversos. Se espera generar un número mayor de interacciones intermoleculares de enlace de hidrógeno generados por los grupos aceptores o donadores presentes o por interacciones π - π debido a la presencia de grupos aromáticos que a través de este enlace de los grupos funcionales presentes en estos residuos de aminoácido, y que al ser evaluados mediante ensayos *in vitro* sean activos contra cepas patógenas para el humano.

Resultados y discusión

Las oxazolidinonas tipo dipéptido fueron sintetizadas empleando dos metodologías diferentes a partir del aminoácido L-alanina. Se obtuvieron análogos de linezólida y de *N*-metiloxazolidinona y fueron acoplados con aminoácidos Fmoc protegidos (Phe, Tyr, Thr, Leu, Ile), obteniéndose rendimientos que van de 20 al 49% (Figura 1). Los compuestos fueron caracterizados por diversas técnicas analíticas como RMN, IRTF, EMIES (Figura 2) y evaluados empleando el método de microdilución en caldo frente a bacterias Gram positivas y negativas.

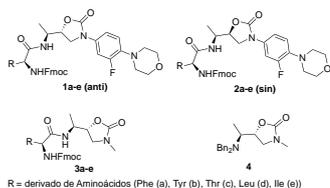


Figura 1. Estructura general de las dipéptido-oxazolidinonas análogos a linezólida (**1** y **2**) y *N*-metiloxazolidinona (**3** y **4**).

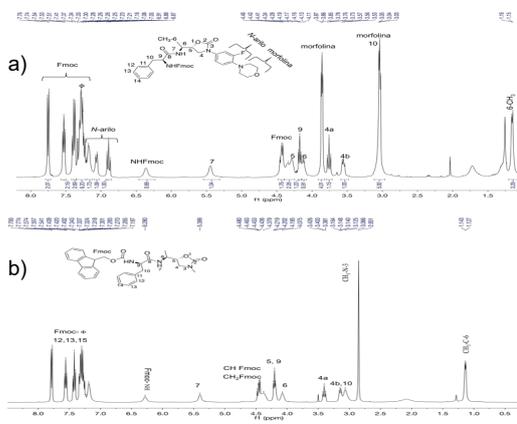


Figura 2. Espectros de RMN-¹H de los compuestos a) **1a** y b) **3a**.

Se realizó una evaluación preliminar de los compuestos **1a-e** (Tabla 1) a una concentración única de 200 μ g/mL. Los resultados muestran que los compuestos **1a** y **1b** presentan actividad frente a diversas bacterias, además de cepas resistentes (MRSA-4). Además se encontró una CMI de 64 μ g/mL para el compuesto **4** sobre la *Enterococcus faecalis*. La actividad puede atribuirse a la formación de enlaces de hidrógeno e interacciones π - π .

Tabla 1. Evaluación preliminar de la actividad antibacteriana de los compuestos **1a-b**.

Compuestos	2	5	9	11	13	MRSA-4	MRSA-5	ATCC 27853	ATCC 25922
	200	200	>200	>200	>200	200	>200	>200	200
	200	200	200	200	>200	200	>200	>200	200

*Cepa 2 = Streptococcus grupo A; Cepa 5 = Staphylococcus aureus; Cepa 9 = Escherichia coli; Cepa 11 = Escherichia coli; Cepa 13 = Salmonella typhi; MRSA-4 y MRSA-5 = Staphylococcus aureus resistente a metilolona (perfil de resistencia: Ampicilina, Penicilina, Dioxalacina, Cefoxitina, Oxalacina, Trimetoprim-Sulfametoxazol y eritromicina).

Conclusiones

Se logró la síntesis de quince dipéptido-oxazolidinonas con resultados preliminares antibacterianos prometedores en busca de moléculas nuevas con actividad biológica.

- Ochoa-Terán, A.; Guerrero, L.; Rivero, I. A. *Sci. World J.* vol. **2014**, Article ID 634935, 10 p, **2014**. doi:10.1155/2014/634935.
- Córdova-Guerrero, J.; Hernández-Guevara, E.; Ramírez-Zatarain, S.; Nuñez-Bautista, M.; Ochoa-Terán, A.; Muñoz-Salazar, R.; Montes-Ávila, J.; López-Angulo, G.; Paniagua-Michel, A.; Nuño-Torres, G. A. *Int. J. Mol. Sci.* **2014**, *15*, 5277-5291.

MECANISMO DE LA RUPTURA DE UN TRIÉSTER DE FOSFATO MEDIANTE UNA CATÁLISIS SUPRAMOLECULAR CON AMIDINIOS Y GUANIDINIOS

David O. Corona-Martínez^a, Jesús R. Valenzuela-Fiel^a, Jesús E. Figueroa-Pérez^a, Luis R. Guerrero-Lara^a, Sandra M. González-Martínez^b y Karen L. Ochoa Lara^b

^aDepartamento de Ciencias de la Salud, Universidad de Sonora, Cd. Obregón, Mexico; ^bDepartamento de Investigación en Polímeros y Materiales, Universidad de Sonora, Hermosillo, Mexico. dvdccch@dirección

Introducción

Los fosfotriésteres son compuestos altamente tóxicos que se emplean como pesticidas para la protección de cultivos agrícolas y, en ocasiones, como armas químicas. Estos se pueden acumular en el suelo, en el suministro de agua y en los productos alimenticios, lo que aumenta el riesgo de exposición humana. Por lo tanto, la eliminación no perjudicial de los fosfotriésteres es una necesidad urgente, ya que sería aplicable no sólo para la descontaminación ambiental, sino también como tratamiento posterior a la exposición o profiláctico^{1,2}. Por lo anterior, existe un gran interés en aplicar reacciones químicas simples que faciliten la degradación de compuestos organofosforados^{3,4}. En este trabajo se estudia el mecanismo de ruptura de un modelo del pesticida paraoxón (NPDPP, 4-nitrofenil difenil fosfato) mediante diferentes amidinios que favorecen una catálisis ácido base, en donde la estructura del catalizador favorece la asociación con el sustrato y también la ruptura catalítica.

Resultados y discusión

Del trabajo previo del efecto de disolvente en la ruptura del NPDPP con guanidinio, se encontró que en las mezclas de dimetilsulfóxido con agua 4:1 en volumen, se presenta una mejor actividad catalítica de la guanidina (catálisis básica general) y además se suprime en gran medida la participación de la catálisis básica específica (por iones hidróxido). Debido a esto se decidió estudiar diferentes amidinios para determinar la relación estructura-actividad en la ruptura del NPDPP. Los amidinios utilizados fueron acetamidinio, benzamidinio y formamidinio, además de guanidina, aminoguanidina y diaminoguanidina. Los estudios cinéticos consistieron en perfiles de concentración y neutralización en la ruptura del NPDPP en las condiciones mencionadas. Además, se determinaron los valores de pKa de los catalizadores en las condiciones de las cinéticas. Con las constantes catalíticas obtenidas con cada compuesto y los valores de pKa se hizo una correlación de Brønsted como se muestra en la figura 1. La relación de Brønsted obtenida fue $\log k = 0.58pK_a - 7.36$. Esto es un indicativo de la sensibilidad de la reacción a la fuerza de la base.

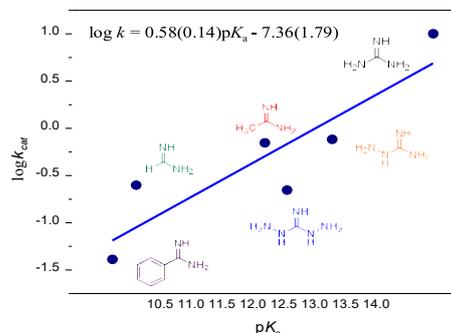


Figura 1. Relación de Brønsted para la reacción de ruptura catalítica del NPDPP en DMSO con agua 4:1.

Esto puede indicar que en el mecanismo de la reacción se desprotona una molécula de agua del medio esta actúa como nucleófilo; experimentos preliminares de efecto isotópico de disolvente ($k_H/k_D = 0.9$) soportan esta aseveración. Además, en los espectros de RMN de ³¹P se observa la formación del difenil fosfato y no una fosforamida. Así mismo, se demostró la asociación entre el difenilfosfato con amidinios, pero esta no se ve afectada por el valor de pKa de los amidinios. Lo anterior podría indicar que en el mecanismo de reacción, una vez protonado, el catalizador podría interaccionar con el complejo activado favoreciendo la reacción.

Conclusiones

Los resultados del presente trabajo muestran evidencia de la participación de agua como nucleófilo en la ruptura del NPDPP. Es posible que una interacción entre el triéster y los amidinios sea fundamental para la aceleración de la ruptura del compuesto.

Referencias

- Bigley, Andrew N.; Raushel, Frank M. Catalytic mechanisms for phosphotriesterases. *Biochimica et Biophysica Acta*. **2013**. 443.
- Enzymatic Mechanisms of Phosphate and Sulfate Transfer. *Chem Rev*. **2006**. 106. 3252.
- Kim, Kibong.; Tsay, Olga G.; Atwood, David A.; Churchill, David G. Destruction and Detection of Chemical Warfare Agents. *Chem. Rev*. **2011**. 111. 5345.
- Edyta Dyguda-Kazimierowicz; Szczepan Roszak; and W. Andrzej Sokalski. Alkaline Hydrolysis of Organophosphorus Pesticides: The Dependence of the Reaction Mechanism on the Incoming Group Conformation. *J. Phys. Chem. B*. **2014**. 118. 7277

FORMACIÓN DE TRIS-ADUCTOS N→B A PARTIR DEL AUTOENSAMBLE DE ÉSTERES BORÓNICOS CON 2,4,6-TRI-(4-PIRIDIL)-1,3,5-TRIAZINA Y ESTUDIO SUPRAMOLECULAR DE LA INCLUSIÓN DE SISTEMAS POLIAROMÁTICOS EN ESTADO SÓLIDO

Vargas-Olvera, Eva C,^a Campillo-Alvarado, Gonzalo,^b MacGillivray, Leonard,^b Rodríguez-Molina, Braulio,^c Morales-Rojas, Hugo^a y Höpfl, Herbert.^a

^a Centro de Investigaciones Químicas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Av. Universidad 1001, 62209, Cuernavaca, México. ^b Department of Chemistry, University of Iowa, Iowa City, IA 52242, USA. ^c Instituto de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, 04510 Ciudad de México, México.

E-mail: eva.vargas@uaem.mx, hhopfl@uaem.mx

Introducción

Los ácidos borónicos y sus derivados ofrecen una amplia versatilidad para interactuar con distintas fracciones moleculares y son una importante fuente de bloques de construcción para el autoensamble de estructuras supramoleculares complejas como macrociclos, jaulas, cápsulas, entre otros. Recientemente se han empleado en la generación de bis-aductos N→B con estructura tipo pinza (Figura 1) y se han evaluado como anfitriones moleculares en el reconocimiento de hidrocarburos aromáticos o hidrocarburos aromáticos policíclicos (HAPs) en estado sólido.^{1,2}

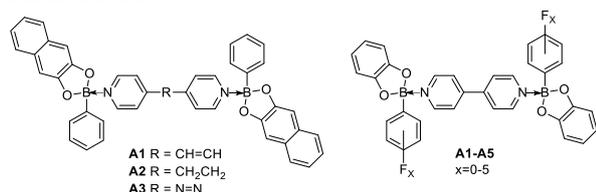


Figura 1

Bis-aductos N→B con la capacidad de reconocimiento de hidrocarburos aromáticos policíclicos (HAPs) en estado sólido.

El presente trabajo plantea la generación de tris-aductos N→B a partir del autoensamble de ésteres borónicos fluorados con 2,4,6-tri-(4-piridil)-1,3,5-triazina y el estudio supramolecular de la inclusión de sistemas poliaromáticos (trifenileno, perileno y coroneno) en estado sólido.

Resultados y discusión

La formación de ésteres borónicos fluorados a partir de la condensación de los correspondientes ácidos borónicos fluorados y la subsecuente reacción con 2,4,6-tri-(4-piridil)-1,3,5-triazina (Figura 2) ha dado lugar a la generación de tris-aductos N→B. Estudios preliminares de inclusión de sistemas poliaromáticos en estado sólido han mostrado que cajas moleculares basadas en enlaces N→B tienen la capacidad de reconocer sistemas poliaromáticos como trifenileno y coroneno. Los sistemas propuestos en nuestro grupo de investigación son

más fáciles de preparar y con funciones similares. Hasta el momento se han logrado obtener las estructuras de rayos-X de monocristal de los tris-aductos derivados de los ésteres fenilborónico y 2,4-difluorofenilborónico, además de los complejos de inclusión con trifenileno y coroneno.

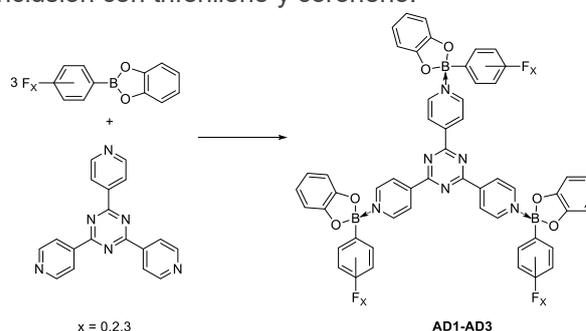


Figura 2

Síntesis de tris-aductos N→B a partir de la reacción de los ésteres borónicos fluorados con la 2,4,6-tri-(4-piridil)-1,3,5-triazina.

Posteriormente se evaluarán sus potenciales aplicaciones en ciencia de los materiales, p. ej. en el área de dinámica molecular en el estado sólido o en el área de superconductividad como complejos orgánicos donador-aceptor.

Conclusiones

Se sintetizaron y caracterizaron dos nuevos tris-aductos N→B y se realizó el estudio supramolecular en el estado sólido de la inclusión de sistemas poliaromáticos.

Referencias

1. A. Herrera, G. Campillo, P. Román, D. Herrera, H. Höpfl, H. Morales, *Cryst. Growth Des.* **2015**, 15, 1572.
2. G. Campillo, E. Vargas, H. Höpfl, A. Herrera, O. Sanchez, H. Morales, L. MacGillivray, B. Rodríguez, N. Farfán, *Cryst. Growth Des.* **2018**, 18, 2726.

Agradecimientos

Los autores agradecen al CONACyT por el apoyo a través de la Red Temática de Química Supramolecular con el número de registro 294810.

REDES SUPRAMOLECULARES Y PROPIEDADES FOTOFÍSICAS EN COMPLEJOS HETEROLÉPTICOS DE Cu(I)

Samuel Soto^a, Adriana Cruz^a, Herbert Höpfl^b y José de Jesús Campos^{*a}

^aFacultad de Ingeniería Mochis, Universidad Autónoma de Sinaloa, Fuente de Poseidón y Prol. Ángel Flores S/N. Fracc. Las Fuentes, C.U., Los Mochis, Sinaloa, México; ^bCentro de Investigaciones Químicas, Instituto de Investigación en Ciencias Básicas y Aplicadas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Av. Universidad 1001, C.P. 62209, Cuernavaca, Morelos, México. samuel.soto.fim@uas.edu.mx

Introducción

En la actualidad, los complejos de Cu(I), son de gran importancia, debido pueden ser aplicados en celdas solares sensibilizadas por colorante (DSSCs) y en diodos orgánicos emisores de luz (OLEDs). Las propiedades fotofísicas de estos compuestos están fuertemente relacionadas con la geometría de coordinación del centro metálico, la cual está influenciada por los efectos estéricos, electrónicos de los ligandos y las interacciones supramoleculares, especialmente en los complejos heterolépticos de Cu(I) del tipo [Cu(NN)(PP)]⁺ donde NN representa ligandos polipiridínicos y PP se refiere a coligandos trifenilfosfina.^{1, 3} En este trabajo se presentará la síntesis, caracterización, estructuras así como las propiedades fotofísicas de los complejos heterolépticos de Cu(I) del tipo [Cu(L)(PPh₃)₂]NO₃ (**1**) (donde L = 5,6-epoxi-5,6-dihidro-1,10-fenantrolina y PPh₃ = trifenilfosfina), [Cu(L)(PPh₃)I] (**2**) y [Cu(L)(dpp)]PF₆, (**3**) (donde dpp = 1,3-bis(difenilfosfina)propano).

Los compuestos se caracterizaron por espectroscopia de IR, ¹H-RMN, ³¹P-RMN y difracción de rayos-X de monocristal. Las propiedades fotofísicas se evaluaron por espectroscopia de UV-Vis y fluorescencia. También se presentará un análisis de los arreglos supramoleculares (incluyendo superficies Hirshfeld) y de cómo estos arreglos influyen en las propiedades luminiscentes en **1-3**.

Resultados y discusión

En las estructuras de rayos-x de los complejos **1**, **2** y **3** se observa que, en las unidades asimétricas, el centro metálico de Cu(I) se encuentra tetra coordinado con una geometría tetraédrica distorsionada con valores de $\tau_4 = 0.825$, 0.824 y 0.813 , respectivamente. En el empaquetamiento cristalino de dichos compuestos se puede ver la formación de unidades diméricas del tipo {[Cu(L)(PPh₃)₂]NO₃}₂, {[Cu(L)(PPh₃)I]}₂ y {[Cu(L)(dpp)]PF₆}₂ mediante interacciones O-H...O, C-H...O, C-H...π y π...π en **1**; π...π en **2**; C-H...F y C-H...π en **3**, figura 1. También se observa que se forman redes supramoleculares 2D mediante la unión de unidades diméricas vinculadas a través de

las interacciones adicionales del tipo C-H...F, C-H...I, C-H...O, C-H...π y π...π.

Mediante el análisis de UV-Vis de los complejos, se encontró que las bandas de absorción TCML, se desplazan hacia el visible ($\lambda = 380$ nm, 345 nm y 355 nm para **1**, **2** y **3**, respectivamente) como consecuencia del aumento de la rigidez asociadas al centro metálico, de acuerdo a los valores de τ_4 .²

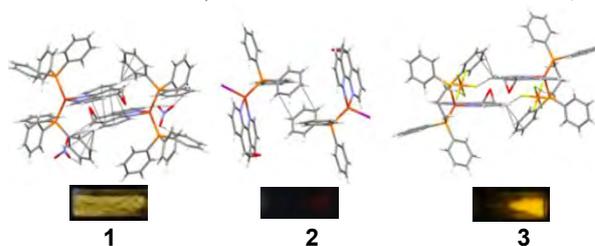


Figura 1. Unidades diméricas y emisión de los complejos heterolépticos de Cu(I) bajo luz UV ($\lambda = 365$ nm).

Por otra parte, la emisión de la luminiscencia de **1**, **2** y **3**, está asociada a la rigidez de las moléculas y al arreglo supramolecular³, en la figura 1 se observa que los compuestos **1** y **3** presentan mayor intensidad de emisión cuando son excitados a $\lambda = 365$ nm, debido a que estos tienen redes supramoleculares más rígidas en comparación con **2**, como consecuencia de las interacciones intermoleculares del tipo O-H...O, C-H...O en **1** y C-H...F, C-H...π en **3**.

Conclusiones

En base a las propiedades fotofísicas encontradas en los complejos **1-3**, como consecuencia de la rigidez molecular y las redes supramoleculares presentes en dichos complejos se concluye que **1** podría ser aplicado como colorante en una DSSCs debido a su absorción en la región del visible, mientras que **3** presenta mayor intensidad de luminiscencia, lo cual lo posiciona como un material prometedor para dispositivos emisores de luz.

Referencias

1. Ragoussi M. E. and Torres, *Chem. Commun.*, **2015**, 19, 3957.
2. Gholivand K., Farshadfar K., Roe S. M., Hosseini M. and Gholami A., *CrystEngComm.*, **2016**, 18, 7104.
3. Zhang Y., Schulz M., Wächter M., Karnahl M and Dietzek B., *Coordination Chemistry Reviews*, **2018**, 356, 127.

DESARROLLO DE POLÍMEROS DONADOR-ACEPTOR Y SU APLICACIÓN EN DISPOSITIVOS FOTOVOLTAICOS ORGÁNICOS

Marisol Güizado-Rodríguez^a, Victor Barba^b, Mario Rodríguez^c y José Luis Maldonado^c

^aCentro de Investigación en Ingeniería y Ciencias Aplicadas (CIICAp)-IICBA-UAEM, Cuernavaca, México; ^bCentro de Investigaciones Químicas (CIQ)-IICBA-UAEM, Cuernavaca, México; ^cCentro de Investigaciones en Óptica, A.C. (CIO), León, México. marisolguizado@uaem.mx

Introducción

Los dispositivos fotovoltaicos orgánicos (OPVs) son una tecnología emergente cuyos beneficios son materiales de bajo costo, procesables, flexibles, de bajo peso, semitransparentes y compatibles con manufacturas de grandes áreas [1]. Estos dispositivos tienen una arquitectura de heterounión de volumen (BHJ), lo cual indica que en la capa activa hay una mezcla entre un polímero donador y una molécula aceptora, Figura 1. Los aceptores más comunes utilizados en esta tecnología son derivados de fullereno, lo cual ha dado eficiencias por encima del 11 % [2]. Polímeros donadores nuevos y pequeñas moléculasceptoras han generado sistemas con eficiencias mayores del 14 % [3].

Los polímeros donadores utilizados tienen una estructura donador-aceptor y han sido sintetizados por reacciones de acoplamiento catalizadas con paladio como las de Suzuki, Stille y arilación directa (DAP), siendo esta última una alternativa debido a que no genera residuos tóxicos [4].

Los parámetros que generan la eficiencia de un polímero en OPVs involucran sus propiedades ópticas y eléctricas como longitud de absorción máxima, niveles HOMO-LUMO, *band gap*, movilidad de electrones y de huecos. Así también otras propiedades fisicoquímicas como estabilidad térmica y distribución de pesos moleculares. Adicional a lo anterior, la morfología y cristalinidad de la capa activa, para lo cual se utilizan diversos disolventes y aditivos; en la capa activa BHJ se necesitan dominios de polímero y fullereno, de tamaño nanométrico (~ 10 nm) para que la migración de los electrones y huecos hacia los electrodos sea eficaz. La morfología de dicha capa está determinada por interacciones intermoleculares como: apilamiento π - π , interacciones de van der Waals: interacciones dipolo-dipolo, puentes de hidrógeno, lo cual involucra a la Química Supramolecular.

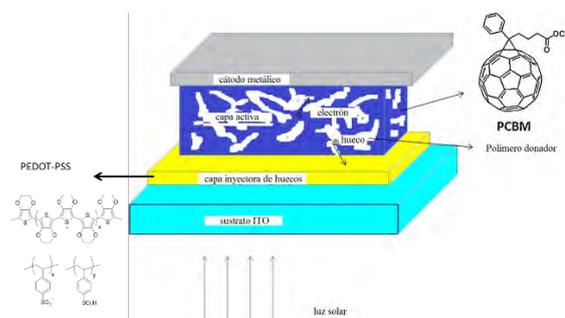


Figura 1. OPV con arquitectura BHJ

Resultados y discusión

Se presentará el análisis de diversos polímeros donador-aceptor derivados del alquiltiofeno, fluoreno, tienotiofeno, dicetopirrolpirrol, benzotiadiazol, tienopirroldiona sintetizados mediante DAP y purificados mediante extracción soxhlet con varios disolventes. Los polímeros sintetizados se caracterizaron mediante RMN de ¹H, DSC, TGA, GPC, FT-IR, UV-vis y voltamperometría cíclica; se aplicaron como polímeros donadores en la capa activa de OPVs con arquitectura BHJ, empleando fullerenos como PC₆₁BM o PC₇₁BM como aceptores y una configuración de celda vidrio/ITO/PEDOT:PSS/capa activa/PFN/ metal de field; la capa activa se caracterizó mediante AFM. Las OPVs se elaboraron en condiciones atmosféricas regulares por la técnica de *spin coating*, consiguiendo eficiencias de conversión de energía (PCE) hasta 2.5 % al modificarse parámetros relacionados como FF, J_{sc} y Voc.

Conclusiones

Se analizó la relación de los parámetros fotovoltaicos de los polímeros donador-aceptor con sus propiedades fisicoquímicas y la morfología de la capa activa en OPVs BHJ, esta última vinculada con interacciones de tipo supramolecular.

Referencias

1. S.R. Forrest, *Nature* 428 (2016) 911.
2. J. Zhao, *et al. Nat. Energy* 1 (2016) 15027.
3. H. Zhang, *et al. Adv. Mater.* (2018) 1800613.
4. A.S. Dudnik, *et al. J. Am. Chem. Soc.* 138 (2016) 15699.

EL EFECTO DE LOS SUSTITUYENTES EN LA POSICIÓN 3 DE ESTADORES ESTEROIDALES

Luis Angel Alfonso^a, Pablo Labra^b María Eugenia Ochoa^a, Daniel Julián Ramírez^c y Rosa Luisa Santillan.^a

^a Departamento de Química, CINVESTAV, CDMEX, México; ^b Facultad de Química, UNAM, CDMEX, México; ^c Facultad de Ciencias Químicas, UV, Orizaba, Ver. México.
rsantill@cinvestav.mx

Introducción

Las máquinas moleculares artificiales que incorporan sistemas anfidinámicos constituyen un enfoque exitoso para diseñar moléculas con movimiento interno en el estado sólido.¹ La dinámica de un rotor molecular está fuertemente relacionada con las interacciones supramoleculares generadas por los estatores, en compuestos que contienen esteroides algunas interacciones comunes son los puentes de hidrógeno: O–H···O, C–H···O, y C–H···π.²

Dos de las interacciones supramoleculares más importantes que han sido observadas en rotores moleculares esteroidales son aquellas generadas por los grupos funcionales en las posiciones 17 y 3.³

En este trabajo se estudia el efecto de un grupo enol éter unido a la posición 3 de un esteroide en el empaquetamiento de un rotor molecular esteroideal.

Resultados y discusión

Con el fin de estudiar la influencia en el empaquetamiento de la cetona en la posición 3 se sintetizó un éter de enol de estisterona (**1**) y su correspondiente rotor molecular (**2**).

En la Figura 1 se muestra la estructura cristalina del rotor **2** en donde se observa la presencia de puentes de hidrógeno entre los hidroxilos de las posiciones 17. La supresión de la interacción clásica entre los hidroxilos de las posiciones 17 y 3 de una molécula vecina se atribuye a la menor energía liberada por la formación del enlace CH₃O···H-O en comparación con la librada para el enlace C=O···H-O.⁴

En la figura 2 se observa la energía de rotación calculada para el compuesto **2**, dos máximos superiores (M1 y M2) a las 20 Kcal/mol son observados, M1 es atribuido a una repulsión estérica entre un hidrógeno del rotador y un hidrógeno de un estator vecino, mientras que M2 es atribuido a la repulsión estérica entre dos hidrógenos de rotadores vecinos, esta repulsión es provocada por la cercanía de los rotadores vecinos, la cual se lleva a cabo debido al puente de hidrógeno entre dos hidroxilos unidos a la posición 17 de dos moléculas vecinas.

Figura 1.- Empaquetamiento del compuesto 2

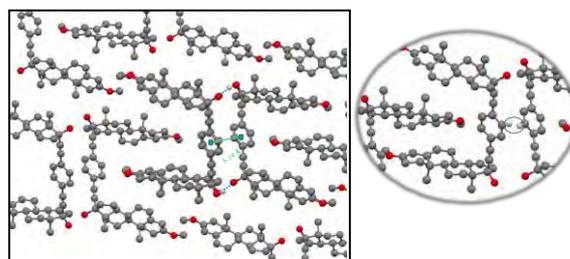
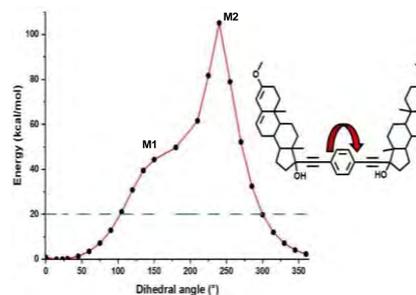


Figura 2.- Energía de rotación del compuesto 2



Conclusiones

El puente de hidrógeno entre dos hidroxilos en la posición 17 de estatores vecinos impide la dinámica del rotador en un rotor molecular debido al impedimento estérico generado por la cercanía de los rotadores. La cetona en la posición 3 de la estisterona evita la formación de esta interacción debido a la mayor energía liberada en la formación del puente de hidrógeno con el hidroxilo en la posición 17.

Referencias

1. M.A. Garcia-Garibay, Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A., 2005, 102, 10771-10776
2. M. E. Ochoa, A. Aguilar-Granda, P.I. Ramirez-Montes, V. Barba, Y. López, R. Santillan and N. Farfán. *CrystEngComm*, **2016**, *18*, 6830.
3. P.I. Ramirez-Montes, M. E. Ochoa, R. Santillan, D. J. Ramirez, and N. Farfán. *Cryst. Growth Des.* **2014**, *14*, 4681-4690
4. J. P. M. Lommerse, S. L. Price, R. Taylor. *J Comput Chem*, **1997**, *18* (6) 757-774.

OBTENCIÓN Y CARACTERIZACIÓN DE UNA SAL DE R-BACLOFENO CON ÁCIDO MÁLICO

Christian Rodríguez-Ruiz,^{a,b} Elva Nettzayeeet Córdova-Villanueva,^{a,b} Obdulia Sánchez-Guadarrama,^a Jesús Rivera-Islas,^b Dea Herrera-Ruiz,^{b,*} Hugo Morales-Rojas,^a y Herbert Höpfl^{a,*}

^aCentro de Investigaciones Químicas, Instituto de Investigación en Ciencias Básicas y Aplicadas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Cuernavaca, México. E-mail: hhopfl@uaem.mx

^bFacultad de Farmacia, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Cuernavaca, México. E-mail: dherrera@uaem.mx

Introducción

Baclofeno (Figura 1) es un ingrediente farmacéutico activo (IFA) quiral para el tratamiento de la espasticidad, distonía, neuralgia y lesiones de la medula espinal, además ha demostrado ser eficaz en el tratamiento de adicción a opiáceos, trastornos de alimentación y alcoholismo. Se comercializa como mezcla racémica bajo el nombre de Lioresal® en tabletas y solución inyectable.

Tomando ventaja de la ingeniería de cristales y utilizando la molienda asistida con gota de disolvente (LAG), este trabajo describe la resolución quiral de *RS*-BAC mediante la formación de una sal diastereomérica de ácido *L*-málico con *R*-Baclofeno, dando pie a la generación de una forma farmacéutica que solo contenga a *R*-BAC, el enantiómero terapéuticamente activo.¹

Resultados y discusión

La molienda asistida con disolvente de *RS*-Baclofeno (*RS*-BAC) con ácido *DL*-málico (*DL*-MA) en estequiometría 1:1 produjo una mezcla de fases cristalinas de las sales enantioméricas *R*-BAC:*L*-MA and *S*-BAC:*D*-MA (Figura 2).

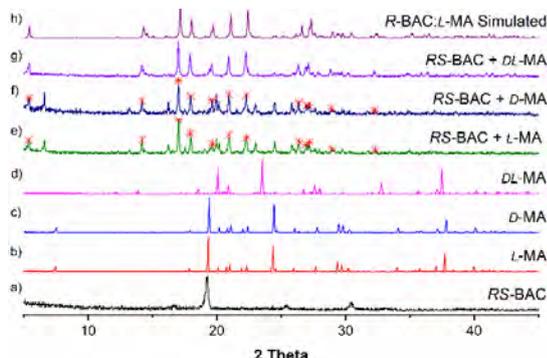


Figura 2. Patrones de DRXP de productos de molienda de las reacciones entre (*RS*)-Baclofeno y ácido (*L*-, *D*- o *DL*-) málico.

Una fase pura de *R*-BAC:*L*-MA se obtuvo por cristalización fraccionada a partir de una solución de *RS*-BAC y *L*-MA en acetato de etilo y agua, de allí

se obtuvo un cristal adecuado para el análisis de DRX de monocristal. El análisis de las interacciones intermoleculares muestra que la estructura cristalina es estabilizada por fuertes interacciones de puente de hidrógeno del tipo $N^+ \cdots H \cdots O$, $N^+ \cdots H \cdots O$ and $O \cdots H \cdots O$ (Figura 3).

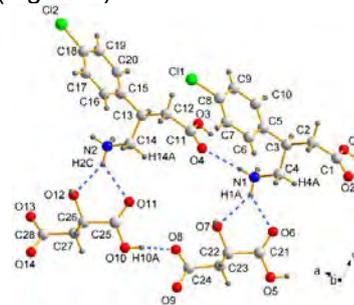


Figura 3. Vista de la unidad asimétrica de *R*-BAC:*L*-MA que muestra parte de las interacciones de enlaces de hidrógeno.

La evaluación biofarmacéutica de *RS*-BAC:*DL*-MA arrojó valores de velocidad de disolución intrínseca y de coeficiente de partición ($\log P = 0.80$ y $K_{\text{intrínseca}} = 9.52 \text{ mg} \cdot \text{min}^{-1} \cdot \text{cm}^{-2}$) similares a los de *RS*-BAC ($\log P = 0.11$ y $K_{\text{intrínseca}} = 9.13 \text{ mg} \cdot \text{min}^{-1} \cdot \text{cm}^{-2}$).²

Conclusiones

El presente trabajo muestra que la resolución quiral de *RS*-BAC puede llevarse a cabo mediante cristalización fraccionada de *R*-BAC:*L*-MA a partir de una solución de *RS*-BAC y *L*-MA. Esta nueva fase sólida tiene propiedades fisicoquímicas y biofarmacéuticas similares a *RS*-BAC y, puede ser una alternativa para la preparación de una forma farmacéutica que contenga solo al enantiómero terapéuticamente activo.

Referencias

1. Kozma, D., *CRC Handbook of Optical Resolutions via Diastereomeric Salt Formation*. ed.; CRC Press: USA, 2001.
2. Ahuja, S., Baclofen. In *Analytical Profiles of Drug Substances*, Florey, K., Ed. Academic Press: 1985; Vol. 14, pp 527-548.

Agradecimientos

Se agradece al CONACyT por las becas otorgadas y por el financiamiento a los proyectos INF-2015-251898, CB-2013-221455 y 741629, y a la Red Temática de Química Supramolecular (No. 294810).

DISEÑO Y SÍNTESIS DE ANÁLOGOS DE LINEZÓLIDA TIPO DIPÉPTIDO BASADOS EN INTERACCIONES SUPRAMOLECULARES

Gema Danira García Olaiz, Adrián Ochoa Terán

Laboratorio de Química Supramolecular, Instituto Tecnológico de Tijuana, Tijuana, B. C., México
ochoa@tectijuana.mx

Introducción

Los análogos de linezólida han cobrado interés desde el surgimiento de cepas resistentes a este fármaco, por lo que es necesario el desarrollo de antibióticos nuevos que generen una tasa menor en el incremento de la resistencia bacteriana. La modificación de linezólida con dipéptidos, podría aumentar la actividad de los compuestos obtenidos comparando con linezólida, debido a la introducción de grupos donadores y aceptores de enlaces de hidrógeno, así como grupos aromáticos que establezcan interacciones de tipo π - π .¹ Los antecedentes muestran que se tiene una actividad mayor del fármaco conforme se incrementan los sitios de interacción de la molécula con el sitio de acción, como en el caso de tedizólida (Figura 1).²

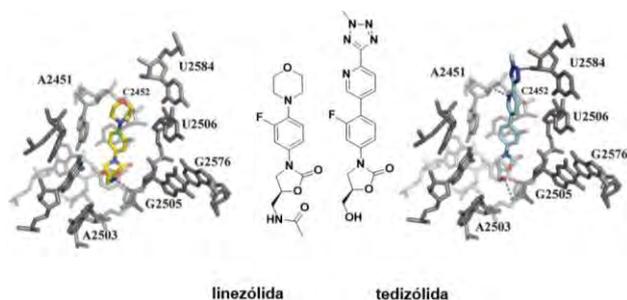


Figura 1. Modelo de interacción de linezólida y tedizólida en la subunidad ribosomal de *E. coli*.

Resultados y discusión

En este trabajo se han obtenido oxazolidinonas *anti* **1** y *sin* **2** a partir del aminoácido L-fenilalanina, con rendimientos del 60% (Figura 2).³

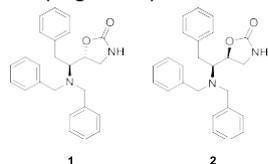


Figura 2. Oxazolidinonas obtenidas a partir de L-fenilalanina.

A partir del acoplamiento de las oxazolidinonas **1** y **2** con la 4-(4-bromo-2-fluorofenil)morfolina **3** se han obtenido los análogos de linezólida **4**, con

rendimientos de 51 y 60%, respectivamente. Posteriormente se desprotegió la amina dibencilada y se llevaron a cabo acoplamientos peptídicos con cinco aminoácidos con rendimientos de 40 a 49% (Figuras 3 y 4).

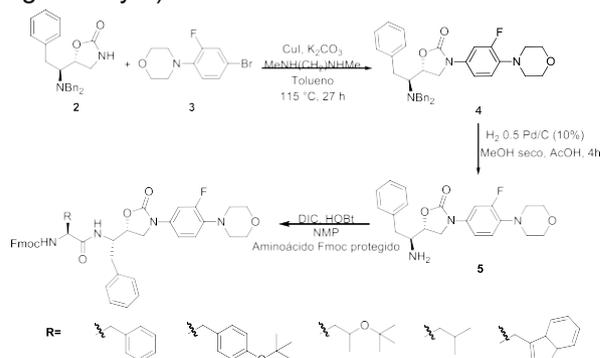


Figura 3. Síntesis de los análogos de linezólida tipo dipéptido.

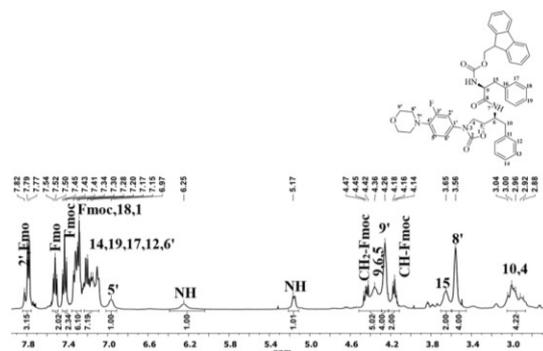


Figura 4. Análisis de RMN H^1 del dipéptido linezólida Phe-Phe.

Conclusiones

Los compuestos obtenidos son candidatos prometedores para ser evaluados como antibacterianos y se espera que presenten una actividad superior a linezólida al tener un número mayor de sitios de interacción.

- Ryppa, C.; Mann-Steinberg, H.; Binossek, M.; Satchi-Fainaro, R.; Kratz, F. *Int. J. Pharm.* **2009**, *368*, 89-97.
- Shaw, K. J.; Poppe, S.; Schaadt, R.; Brown-Driver, V.; Finn, J.; Pillar, C. M.; Shinabarger, D.; Zurenko, G. *Antimicrob. Agents. Chemother.* **2008**, *52*, 4442-4447.
- Córdova-Guerrero, J.; Hernández-Guevara, E.; Ramírez-Zatarain, S.; Núñez-Bautista, M.; Ochoa-Terán, A.; Muñiz-Salazar, R.; Montes-Ávila, J.; López-Angulo, G.; Paniagua-Michel, A.; Nuño Torres, G. A. *Int. J. Mol. Sci.* **2014**, *15*, 5277-5291.

ANÁLISIS ESTRUCTURAL DE DERIVADOS DEL ÁCIDO 3-AMINOFENILBORÓNICO

Jacobo Rivera-Segura, Arturo González-Hernández, Víctor Barba-López
Centro de Investigaciones Químicas (CIQ-IICBA, UAEM), Cuernavaca, Morelos, México.
jacoboriveras@uaem.edu.mx

Introducción

Los ácidos borónicos se convierten generalmente a ésteres vía condensación con alcoholes ó dioles alifáticos ó aromáticos.

En este contexto, el ácido 3-aminofenilborónico se ha empleado en la generación de macrociclos y jaulas.¹ Los grupos -OH y -NH₂ del ácido antes mencionado pueden actuar como aceptores o donadores de enlaces de hidrógeno tanto inter- como intramolecularmente.²

El presente trabajo describe el análisis estructural de cuatro derivados, los cuales se obtuvieron por medio de reacciones de condensación a partir del ácido 3-aminofenilborónico con 2,6-piridincarboxialdehído ó 2,2-bis (hidroximetil) 1,3-propanodiol (pentaeritritol).

Se obtuvieron dos ésteres de boro y dos derivados di catiónicos de ácidos borónicos empleando reacciones de condensación. Además se obtuvieron dos sales del ácido 3-aminofenilborónico como se muestra en la Figura 1.

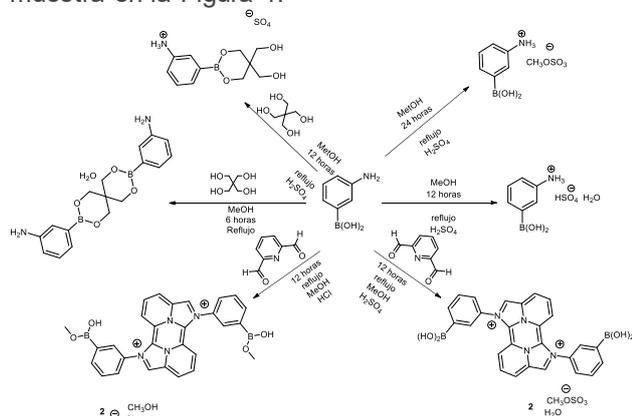


Figura 1. Esquema de los diferentes derivados obtenidos a partir del ácido 3-aminofenilborónico.

Resultados y discusión

El análisis estructural por RMN y difracción de Rayos-X confirmaron la obtención de dos sales del ácido 3-aminofenilborónico con diferentes contra iones, la obtención del ester correspondiente disustituido y monosustituido derivados de la reacción con el pentaeritritol. Además de dos compuestos heterocíclicos di catiónicos con el 2,6-piridincarboxialdehído incluyendo dos contra iones diferentes como se muestra en la Figura 2.

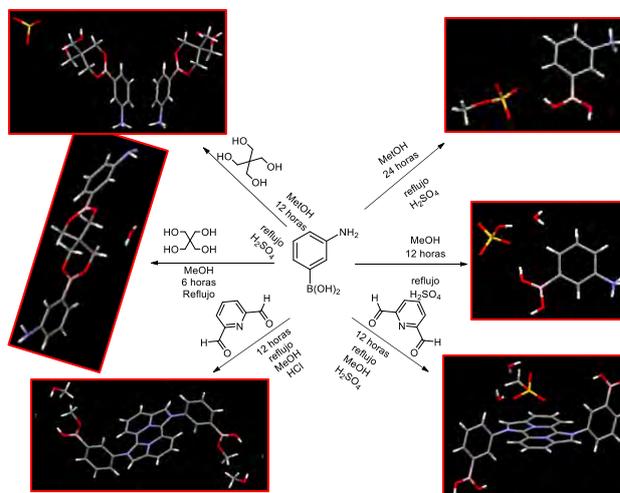


Figura 2 Estructura de los derivados en estado sólido

El análisis estructural en estado sólido muestra que la presencia de diferentes grupos donadores y aceptores de enlace de hidrógeno, favorecen las interacciones secundarias, formando así ciclos de 7, 8, 10 y 12 miembros con interacciones tipo CH...O, CH...π, CH...Cl, NH...O, NH...π, B...π, OH...Cl las cuales en conjunto dan lugar a arreglos supramoleculares en 1D, 2D, y 3D.

Conclusiones

Se observó que la presencia del anión favorece la cristalización en varios de los sistemas y cambia el empaquetamiento en cada sistema cristalino.

La presencia de iones como: (HSO₄-1), (CH₃OSO₃-1) y (SO₄-2), así como también moléculas de agua favorecen la estabilización de los complejos mediante el incremento de los enlaces de hidrógeno.

Referencias

1. N. A. Celis, C. Godoy-Alcantara, J. Guerrero Alvarez, V. Barba, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2014**, 1477.
2. V. Barba, H. Hopfl, N. Farfan, R. Santillan, H. I. Beltran, L. S. Zamudio Rivera. *Chem. Commun.* **2004**, 2834.

TRABAJOS EN CARTEL

SÍNTESIS DE QUIMIOSENSORES ÓPTICOS Y SU APLICACIÓN EN LA DETECCIÓN DE ANIONES Y CATIONES	...23
ESTUDIO DE LA INTERACCIÓN SUPRAMOLECULAR DE NAFTALENDIIMIDAS NUEVAS CON ANALITOS DE INTERÉS	...24
SÍNTESIS DE RECEPTORES HETEROTÓPICOS Y LA EVALUACIÓN DE SU INTERACCIÓN SUPRAMOLECULAR CON ANIONES Y CATIONES	...25
SÍNTESIS Y CRISTALIZACIÓN DE GIROSCOPIOS MOLECULARES COMO POTENCIALES INTERRUPTORES MOLECULARES.	...26
DISEÑO Y CARACTERIZACIÓN DE AZOPIRIDINAS CON PROPIEDADES DE CRISTAL LÍQUIDO Y POTENCIAL PARA AUTOENSAMBLARSE VÍA PUENTE DE HALÓGENO	...27
ESTUDIO ESTRUCTURAL DE 2-AZACHALCONAS COMO POSIBLES SEMI-CONDUCTORES ORGÁNICOS.	...28
ESTABILIDAD DE DICARBOXILATOS DE ESTAÑO POR RMN ^{119}Sn	...29
DITIOCARBAMATOS DE ESTAÑO COMO SISTEMAS REVERSIBLES EN MEDIO ACIDO-BÁSICO	...30
ELABORACIÓN DE BIOPELÍCULA INDICADORA DE pH A BASE DE GELATINA Y JAMAICA	...31
ESTUDIO ESTRUCTURAL DE DERIVADOS BODIPY CON POSIBLE APLICACIÓN COMO SONDAS FLUORESCENTES.	...32
SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE PARTÍCULAS POLIMÉRICAS DE ALTA SENSIBILIDAD	...33
DERIVADOS DEL ALCALOIDE TETRANDRINA COMO POSIBLES SONDAS DE ADN PARA MICROSCOPIA DE FLUORESCENCIA	...35
SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE BODIPYS ACOPLADOS A CARBORANOS CON POTENCIALES APLICACIONES COMO MATERIALES SEMICONDUCTORES	...36

INTERACCIÓN MOLECULAR DE EGCG Y RESVERATROL CON NANOPARTÍCULAS DE ORO Y PLATA	...37
ANÁLISIS ESTRUCTURAL DE UNA SERIE DE DERIVADOS DE TETRANDRINA Y LA INFLUENCIA DE SU ESTRUCTURA MOLECULAR EN EL AUTOENSAMBLAJE	...38
RECEPTORES BIS-UREA CON ESPACIADOR POLIÉTER PARA EL RECONOCIMIENTO DE ANIONES Y SALES	...39
SIMPLE SYNTHESIS OF MIL-101 METAL-ORGANIC FRAME LOADED WITH Fe ₃ O ₄ NANOPARTICLES FOR MAGNETIC REMOVAL OF CONGO RED	...40
ESTUDIO DE LA REACTIVIDAD DE COMPLEJOS REDUCTORES ESTEREOSELECTIVOS SOPORTADOS EN FASE SÓLIDA	...41
APLICANDO LA SÍNTESIS DE ÍNDOLES DE LAROCK EN LA PREPARACIÓN DE BODIPYS CON POTENCIAL APLICACIÓN COMO SEMICONDUCTORES ORGÁNICOS	...42
SÍNTESIS DE DERIVADOS DE BORO-DIPIRROMETENO (BODIPY) FUNCIONALIZADOS CON GRUPOS AMINO COMO POSIBLES SEMICONDUCTORES ORGÁNICOS	...43
SÍNTESIS DE CATALIZADORES DITÓPICOS (FENOL-GUANIDINA) PARA LA RUPTURA DE ÉSTERES DE FOSFATO	...44
EFFECTO DEL DISOLVENTE EN LA RUPTURA SUPRAMOLECULAR DE UN TRIÉSTER DE FOSFATO	...45
SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE NUEVOS CRISTALES MOLECULARES DERIVADOS DE BENZOQUINONAS	...47
SÍNTESIS, CARACTERIZACIÓN Y EVALUACIÓN ANTIOXIDANTE DE COMPLEJOS LANTÁNIDOS DERIVADOS DE MACROCICLOS	...48
ARREGLOS SUPRAMOLECULARES FORMADOS POR ÁCIDOS BORÓNICOS Y FOSFATOS: PROPIEDADES LUMINISCENTES Y ANÁLISIS DE LA SUPERFICIE HIRSHFELD	...49
LIGANTE TRICARBOXÍLICO Y SU USO POTENCIAL PARA LA SINTESIS DE MATERIALES 3D, FORMACION DE MOFs CON TIERRAS RARAS	...50

INTERACCIÓN DE HISTIDINA E HISTAMINA CON EL COMPLEJO [Yb(cy1a)]	...51
EVALUACIÓN DE ACTIVIDAD ANTIOXIDANTE Y BIOMIMÉTICA DE LOS RECEPTORES TIPO CICLOFANO PO, PC, OD Y SUS COMPLEJOS CON Cu(II)	...52
NANOTUBOS DE ÓXIDO DE TITANIO PARA MEJORAR LA PROLIFERACIÓN CELULAR SOBRE TITANIO PURO	...53
SÍNTESIS DE BASES DE SCHIFF TIPO SALOFEN DERIVADAS DE NÍQUEL CON POSIBLES PROPIEDADES DE ÓPTICA NO LINEAL	...54
SÍNTESIS, CARACTERIZACIÓN Y ESTUDIOS DE ADSORCIÓN EN LA INTERFACE AIRE- AGUA DE BASES DE SCHIFF MACROCÍCLICAS	...55
SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN FÍSICOQUÍMICA DE RECEPTORES ACÍCLICOS DERIVADOS DE BENCIMIDAZOL	...56
FORMACIÓN DE SISTEMAS MACROCÍCLICOS MEDIANTE EL AUTOENSAMBLE DE BLOQUES DINUCLEARES DE ORGANOESTAÑO (IV) Y DICARBOXILATOS	...57
ANÁLISIS DE LAS INTERACCIONES INTERMOLECULARES Y SU INFLUENCIA EN LAS PROPIEDADES LUMINISCENTES DE LOS COMPUESTOS [C ₁₈ H ₁₄ N ₅]Cl Y [C ₁₈ H ₁₅ N ₅]Cl ₂ ·H ₂ O	...58
SÍNTESIS, CARACTERIZACIÓN DE ROTORES MOLECULARES BODIPY'S CON POSIBLE TINCIÓN CELULAR SELECTIVA	...59
A COMBINED THEORETICAL AND EXPERIMENTAL STUDY OF GEOMETRICAL AND OPTICAL PROPERTIES OF THE <i>DTPA-AMIDE</i> CYCLOPHANE	...60
SÍNTESIS, ANÁLISIS ESTRUCTURAL Y PRUEBAS BIOLÓGICAS DE COMPLEJOS METÁLICOS QUE CONTIENEN METALOHETEROCICLOS AS (III) Y SB (III) Y UN LIGANDO DE DITIOFOSFONATO	...61
ESTUDIO QUÍMICO Y ESTRUCTURAL DE COMPLEJOS DE ORGANOESTAÑO CON EL LIGANTE DITIOCARBAMATO DE EFEDRINA.	...62
PREPARACIÓN DE NANOPARTÍCULAS MAGNÉTICAS FLUORESCENTES Y SU MODIFICACIÓN CON POLÍMEROS BIOCOMPATIBLES	...63

DISEÑO DE MATERIALES POROSOS DE BORO PARA EL ALMACENAMIENTO DE FARMACOS E HIDROCARBUROS: ESTUDIO TEÓRICO	...64
ESTUDIO COMPARATIVO DE LOS COMPLEJOS DE Cu^{2+} y Fe^{3+} DE UN AZA-CICLOFANO, Y SU ANÁLOGO DE CADENA ABIERTA	...65
SÍNTESIS DE NANOCLUSTERS DE Ag RECUBIERTOS CON POLIETILENIMINA Y SU APLICACIÓN COMO POSIBLE SENSOR DE IONES METÁLICOS Y EL pH	...66
ESTUDIO DEL LIGANTE 1-(4-HIDROXIFENIL)-3-(4-NITROFENIL) TIOUREA COMO SENSOR COLORIMETRICO PARA EL ION FLUORURO EN SOLUCIÓN Y SOPORTADO EN UN POLIMERO	...67
SÍNTESIS Y APLICACIONES CATALÍTICAS DE COMPLEJOS DE Ir(III) Y Rh(III) CON LIGANDOS TRIAZENURO FUNCIONALIZADOS CON QUINOLINA O IMIDAZOL	...68
SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN ESTRUCTURAL DE DOS OXALAMIDAS TIPO PINZA A PARTIR DE LA 2,6-DIAMINOPIRIDINA	...69
SÍNTESIS DE BODIPYs CON POSIBLE APLICACIÓN EN OPTOELECTRÓNICA	...70
SÍNTESIS, CARACTERIZACIÓN Y ESTUDIOS DE COMPUESTOS POLIAZAMACROCICLICOS	...71
SÍNTESIS DE DERIVADOS 1,3-OXAZOLIDIN-2-ONA ENANTIOMÉRICAMENTE PUROS Y CON ACTIVIDAD ANTIBACTERIAL A PARTIR DE L-ALANINA	...72
SÍNTESIS DE OXALAMIDAS TIPO PINZA DERIVADAS DEL ÁCIDO (+/-)-TRANS-N,N'-CICLOHEXAN-1,2-DIILDIOXALÁMICO	...73
SÍNTESIS DE CO-CRISTALES ESTEROIDALES AUTOENSAMBLADOS MEDIANTE ENLACES DE HALÓGENO	...74
RECEPTORES BIS-UREA PARA ANIONES Y SALES DE IMPORTANCIA BIOLÓGICA Y AMBIENTAL	...75
SÍNTESIS DE ESPIROBORATOS Y EVALUACIÓN DE SUS PROPIEDADES FLUORESCENTES	...76

QUIMIODETECCIÓN BASADA EN EL ESTUDIO DE INTERACCIONES SUPRAMOLECULARES PARA LA DISCRIMINACIÓN FLUORESCENTE DE ANIONES A TRAVÉS DE UN SENSOR MOLECULAR DE ZN(II)	...77
SÍNTESIS DE COMPLEJOS DE NITROSIL RUTENIO, CON LIGANTES DEL TIPO 2,2':6',2"-TERPIRIDINA Y 2,2'-BIPYRIDINA, PARA LA FOTOLIBERACIÓN DE NITROSIL	...78
DISEÑO Y EVALUACIÓN DE UN GEL SUPRAMOLECULAR A PARTIR DE TRANS-CINAMATO DE SODIO	...79
INCORPORACIÓN DE CLOTRIMAZOL EN SISTEMAS POLIMÉRICOS SUBMICRÓNICOS DE ACETATO FTALATO DE CELULOSA	...80
SÍNTESIS DE NANOCÁPSULAS POR AUTOEMULSIFICACIÓN <i>IN SITU</i> PARA LA ADMINISTRACIÓN DE UN ANTIEPILÉPTICO	...81
LIBERACIÓN TRANSDÉRMICA PROMOVIDA POR MICROAGUJAS DE KETOROLACO TROMETAMINA FORMULADO EN LIPOSOMAS ELÁSTICOS	...82
SEPARACIÓN DE HIDROCARBUROS EMPLEANDO SILICATOS MICROPOROSOS	...83
CÚMULOS DE ÓXIDO DE MAGNESIO COMO CANDIDATOS PARA EL ALMACENAJE DE HIDRÓGENO MOLECULAR: ESTABILIDAD ENERGÉTICA E INTERACCIÓN CÚMULO-H ₂	...84

SÍNTESIS DE QUIMIOSENSORES ÓPTICOS Y SU APLICACIÓN EN LA DETECCIÓN DE ANIONES Y CATIONES

Angel García, Adrián Ochoa Terán y Christian Leonardo Castro Riquelme

Laboratorio de Química Supramolecular, Instituto Tecnológico de Tijuana, Tijuana, B. C., México
ochoa@tectijuana.mx

Introducción

Las especies aniónicas y catiónicas se encuentran presentes en todos los sistemas biológicos y juegan un papel importante en medicina, catálisis y el área ambiental.¹ En la actualidad las moléculas receptoras neutras para diferentes aniones han llamado mucho la atención debido a la gama amplia de propiedades ópticas y electrónicas, así como aplicaciones en sensores colorimétricos. En particular los grupos receptores tipo urea-aminobenzamida ya que propician la formación de complejos supramoleculares mediante enlaces de hidrógeno (figura 1).²

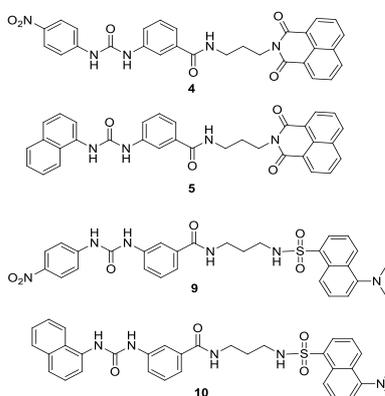


Figura 1. Quimiosensores ópticos.

Resultados y discusión

Se sintetizaron y caracterizaron por técnicas espectroscópicas y espectrométricas cuatro quimiosensores obtenidos con rendimientos del 30 al 50%.

En el estudio de **4** por UV-Vis se logró identificar una banda nueva a los 480 nm por la posible desprotonación de los hidrógenos de la urea, lo que propicia un cambio colorimétrico en la región visible del espectro (Figura 2).

Por otro lado, el quimiosensor **9** mostró una sensibilidad alta hacia los iones de Cu^{2+} resultando en el abatimiento de la fluorescencia por la posible participación del par de electrones de la amina terciaria del dansilo, formando así un complejo metal-ligando 1:1 (figura 3).

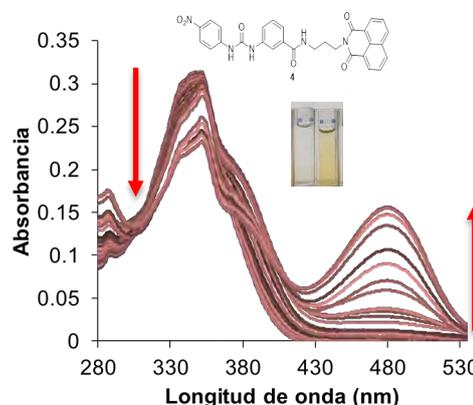


Figura 2. Espectro de absorción de **4** con F^- .

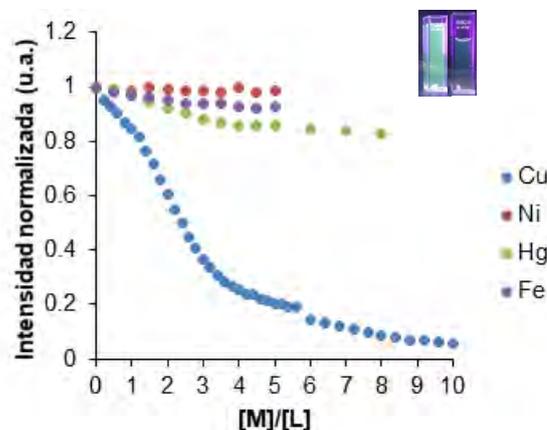


Figura 3. Titulación de **9** con cationes (M^{+2}).

Conclusiones

Los quimiosensores sintetizados mostraron tener sensibilidad hacia aniones F^- , acetato y benzoato, debido a la factibilidad que tiene el grupo urea con estos aniones.

Además, el quimiosensor **9** mostró sensibilidad alta hacia Cu^{2+} lo que lo hace un buen candidato como sensor fluorescente de cobre.

Referencias

- Roshan, F.; Zhenghao, M.; Evan, M.; Fei, R.; Sauvé, G. J. *Phys. Chem.* **2014**, *118*, 3433-3442.
- Moreno-Valle, B.; Ochoa-Terán, A. Aguilar-Martínez, M. *Supramolecular Chemistry* **2018**, *30*, 9-19.

ESTUDIO DE LA INTERACCIÓN SUPRAMOLECULAR DE NAFTALENDIIMIDAS NUEVAS CON ANALITOS DE INTERÉS

José Antonio Alatorre Barajas, Adrián Ochoa Terán y Oscar Uriel Villanueva Contreras

Laboratorio de Química supramolecular y Nanosenores Ópticos, Instituto Tecnológico de Tijuana, Tijuana, B. C. México.
ochoa@tectijuana.mx

Introducción

En las últimas décadas ha surgido la necesidad de desarrollar materiales capaces de detectar de manera sensible y selectiva una variedad especies con impacto biológico y ambiental.¹ Las naftalendiimidas (NDIs) se presentan como candidatos ideales debido a sus propiedades fisicoquímicas especiales.² Las NDIs pueden ser simétricas o no simétricas y presentar o no sustituyentes en el naftaleno. En la figura 1 se muestran las vías de síntesis de NDIs a partir del dianhídrido naftoico (1).

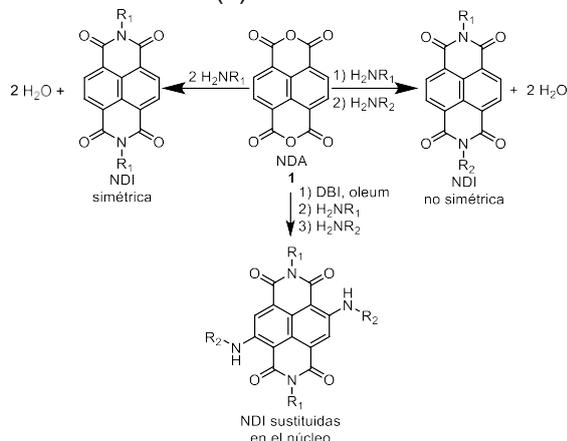


Figura 1. Rutas de síntesis de NDIs.

Existe un gran interés en la síntesis de NDIs sustituidas en el núcleo debido a su versatilidad de funcionalización y propiedades ópticas modulables.

Resultados y discusión

En este trabajo se ha preparado una serie de NDIs con sustituyentes diferentes en la imida y en el naftaleno para modular sus propiedades fotoluminiscentes y su interacción con especies diversas. Por ejemplo, las NDIs 2 y 3 tienen sustituyentes 4-piridilmetileno en las imidas y uno y dos sustituyentes hexilamino en el naftaleno, respectivamente. En la Figura 2 se comparan sus espectros de fluorescencia y se observa que la intensidad y el desplazamiento de las bandas dependen del número de sustituyentes. Existe una deslocalización electrónica mayor en la NDI 3 y las

bandas se desplazan más hacia el rojo con intensidad mayor.

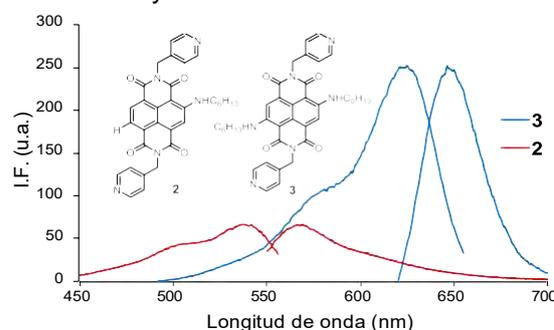


Figura 2. Espectros de fluorescencia de las NDIs 2 y 3.

La NDI 2 presentó cambios en la emisión a un pH de 3 a 5 (figura 3). Este comportamiento se atribuye a la inhibición de la transferencia electrónica fotoinducida (PET) que existe entre los grupos piridilo y naftaleno de la NDI cuando se protonan las piridinas.³

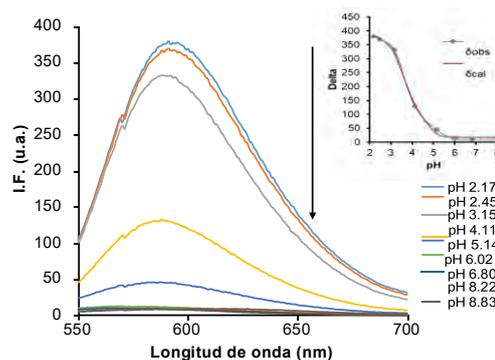


Figura 3. Efecto del pH en la emisión de la NDI 2.

Conclusiones

Una variedad de NDIs han sido preparadas y los estudios demuestran que pueden interactuar con especies diversas dependiendo de los grupos funcionales presentes en su estructura.

Referencias

- Guha, S.; Saha, S. *J. Am. Chem. Soc.* **2010**, *132*, 17674-17677.
- Aşir, S.; Demir, A.; İcil, H. *Dyes Pigm.* **2010**, *84*, 1-13.
- Martínez-Quiroz, M.; Ochoa-Terán, A.; Pina-Luis, G.; Santacruz Ortega, H. *Supramol. Chem.* **2017**, *29*, 32-39.

SÍNTESIS DE RECEPTORES HETEROTÓPICOS Y LA EVALUACIÓN DE SU INTERACCIÓN SUPRAMOLECULAR CON ANIONES Y CATIONES

Jorge Tito Escobedo Robledo,^a Adrián Ochoa Terán,^a Karen L. Ochoa-Lara^b

^aLaboratorio de Química Supramolecular y Nanosensores Ópticos, Instituto Tecnológico de Tijuana, Tijuana, B. C. México. ^bLaboratorio de Química Supramolecular, DIPM de la Universidad de Sonora, Hermosillo, Son. México. ochoa@tectijuana.mx

Introducción

En la actualidad, la química supramolecular es un área de investigación de gran interés y ha destacado con desarrollos científicos nuevos en el área de la química anfitrión-huésped. La presencia de dos zonas diferenciadas para el reconocimiento de un catión o un anión constituye la base de los receptores ditópicos, mientras que un receptor heterotópico tiene la capacidad de reconocer especies distintas. Estos receptores, en particular los que contienen el grupo funcional urea, han sido utilizados en campos muy diversos, como la solubilización de sales y el transporte a través de membranas,^[1] la detección^[2] y el reconocimiento aniónico mediante interacción cooperativa del anión con un centro metálico y el grupo dador de enlace de hidrógeno.^[3]

El objetivo de este trabajo es la síntesis, estudio de las propiedades ópticas y del reconocimiento molecular de receptores formados por dos grupos urea interconectados mediante cadenas de poliamina de longitud variable. Además, éstos cuentan con grupos nitrofenilo o naftilo responsables de señalar la interacción de los receptores con los analitos.

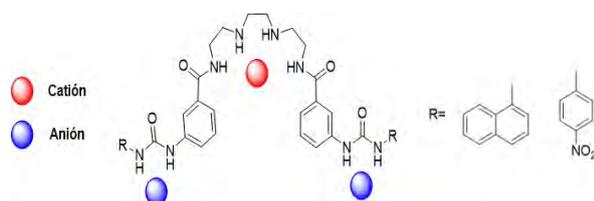


Figura 1. Receptores bis-urea heterotópicos.

Se espera que estos receptores presenten interacción con especies aniónicas, catiónicas, y también un reconocimiento simultáneo de ambas especies formando complejos por medio de interacciones supramoleculares con una afinidad cuantificable basados en cambios espectroscópicos (Figura 1).

Resultados y discusión

La síntesis de los receptores se inicia con la reacción de dos equivalentes de cloruro de 3-nitrobenzoilo con un equivalente de la poliamina con longitud de cadena diferente ($n = 1, 2$ y 3), obteniéndose las bis-nitrobenzamidas **5**. Posteriormente se realiza la reducción catalítica de los grupos nitro utilizando $H_2/Pd/C$ 10% como agente reductor obteniendo así las bis-aminobenzamidas **6**. A partir **6** se sintetizan las bis-ureas **7** mediante una reacción con dos equivalentes del isocianato correspondiente.

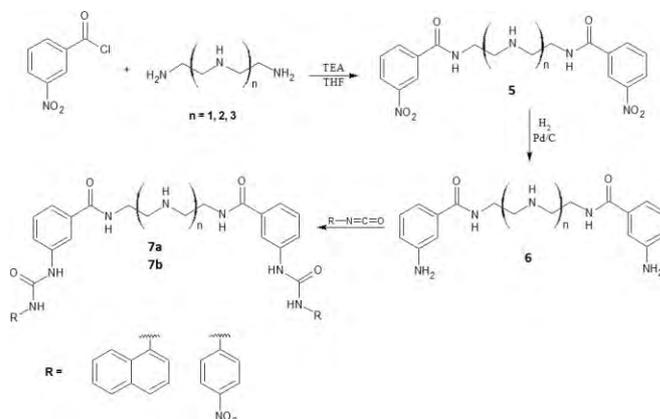


Figura 2. Rutas de síntesis de receptores bis-urea heterotópicos.

Conclusiones

Al momento se ha concluido con la síntesis de los receptores y se empezará con los experimentos de reconocimiento.

Referencias

- Kim, S. K.; Sessler, J. L. *Chem. Soc. Rev.*, **2010**, 39, 3784.
- a) Piatek, P. *Chem. Commun.*, **2011**, 47, 4745; b) He, X.; Yam, V. W.-W. *Inorg. Chem.*, **2010**, 49, 2273.
- a) Amendola, V.; Esteban-Gómez, D.; Fabbrizzi, L.; Licchelli, M.; Monzani, E.; Sancenón, F. *Inorg. Chem.*, **2005**, 44, 8690; b) Allevi, M.; Bonizzoni, M.; Fabbrizzi, L. *Chem.-Eur. J.*, **2007**, 13, 3787.

SÍNTESIS Y CRISTALIZACIÓN DE GIROSCOPIOS MOLECULARES COMO POTENCIALES INTERRUPTORES MOLECULARES.

Ma. Eugenia Ochoa,^a Pablo Labra-Vázquez^b Norberto Farfán,^{a*} y Rosa Santillan^{a*}

^aDepartamento de Química, Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del IPN, Apdo. Postal 14-740, 07000, México. ^bFacultad de Química, Departamento de Química Orgánica, Universidad Nacional Autónoma de México, 04510 México D.F., México. norberto.farfán@gmail.com, rsantillan@cinvestav.mx

Introducción

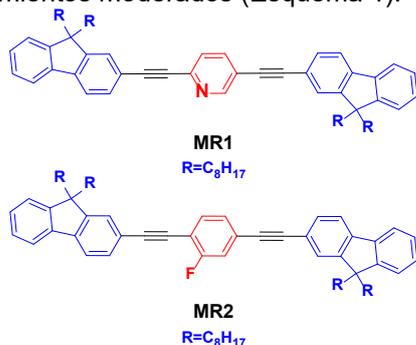
Los sistemas moleculares anfodinámicos, definidos como arreglos cristalinos supramoleculares que, a pesar de su alto orden de fase, presentan dinámica molecular, tienen potencial para actuar como rotores moleculares, máquinas capaces de presentar trabajo rotacional eficiente, simular al de giroscopios o brújulas.

Nuestro grupo ha estudiado la dinámica rotacional de rotores moleculares con estatores rígidos esteroidales unidos mediante ejes acetilénicos a rotatores tipo 1,4-fenileno.¹⁻³ En el curso de estas investigaciones, la posibilidad de modificar la dinámica rotacional con la aplicación de un campo electromagnético, resultó atractiva, por lo cual nos propusimos evaluar rotores moleculares con un momento dipolar neto $\mu \neq 0$ con grupos 9-octilfluorenilo como estatores y anillos de fluorobenceno y piridina como rotatores polares.

Hemos propuesto recientemente que los momentos dipolares presentes en estas moléculas pueden ser orientados aplicando un campo electromagnético y con ello se module la dinámica rotacional en estos ensamblajes supramoleculares.

Resultados y discusión

Mediante una metodología sintética en 4 pasos, fue posible obtener los rotores moleculares **MR1** y **MR2** en rendimientos moderados (Esquema 1).



Esquema 1. Estructura de los rotores moleculares **MR1** y **MR2**. En azul están los estatores, en negro los ejes acetilénicos y en rojo los rotatores.

Se estudió la estructura cristalina de estos compuestos que mostró la orientación de los momentos dipolares a lo largo del eje cristalográfico *b*, así como la formación de ensamblajes tipo bicapa (Figura 1)

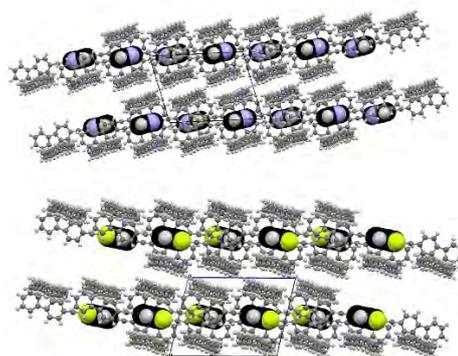


Figura 1. Representación esquemática de las bicapas formadas en la estructura cristalina de **MR1** (arriba) y **MR2** (abajo).

Empleando métodos computacionales, hemos podido determinar bajas energías de activación para el proceso rotacional en estos compuestos, así como su potencial aplicación como interruptores moleculares.

Conclusiones

Se estudió la estructura cristalina y las energías de activación para rotores moleculares basados en estatores de fluoreno y rotatores polares. Los resultados apuntan a un comportamiento tipo giroscopio molecular y a posibles aplicaciones como interruptores moleculares.

Referencias

1. Czajkowska-Szczykowska, D.; Rodríguez-Molina, B.; Magaña-Vergara, N. E.; Santillan, R.; Morzycki, J. W.; Garcia-Garibay, M. A., *J. Org. Chem.* **2012**, *77*, 9970-9978.
2. Rodríguez-Molina, B.; Farfán, N.; Romero, M.; Méndez-Stivalet, J. M.; Santillan, R.; Garcia-Garibay, M. A., *J. Am. Chem. Soc.* **2011**, *133*, 7280-7283.
3. Rodríguez-Molina, B.; Ochoa, M. E.; Romero, M.; Khan, S. I.; Farfán, N.; Santillan, R.; Garcia-Garibay, M. A., *Cryst. Growth Des.* **2013**, *13*, 5107-5115.
4. Ochoa M. E.; Labra-Vázquez P.; Farfán N.; Santillan R., *Cryst. Growth Des.* **2018**, *18* (5), 2795 - 2803.

DISEÑO Y CARACTERIZACIÓN DE AZOPIRIDINAS CON PROPIEDADES DE CRISTAL LÍQUIDO Y POTENCIAL PARA AUTOENSAMBLARSE VÍA PUENTE DE HALÓGENO

Liliette Barcelona Cazanave^a, Nayely Trejo Carbajal^a, Rosa Julia Rodríguez González^a y Dámaso Navarro Rodríguez^a

^aDepartamento de Materiales Avanzados, Centro de Investigación en Química Aplicada (CIQA), Blvd. Enrique Reyna No. 140 Col San José de los Cerritos, Saltillo, CP. 25294, México. lbarcelonacazanave@gmail.com

Introducción

Establecer orden y complejidad en los materiales, empleando el autoensamble de moléculas simples es un área importante de la ciencia contemporánea.¹ El azobenceno se desempeña como un foto-activador eficiente que controla dichas propiedades en sistemas de CL. En 2014, Yu *et al.* indujeron ópticamente transiciones de fase en complejos entre azopiridinas y halógenos moleculares.² En el 2016, se presentaron azocompuestos unidos por puente de halógeno (PHa) y su potencial para ser utilizados como fotoactuadores. La presencia de la piridina resulta en un comportamiento mesomórfico complejo con fases esmécticas de alto orden.³ En 2017 se sintetizó un monómero portador de un grupo piridilazobenceno, y se obtuvo un polímero ensamblado vía PHa al pentayodofluoro-benceno, obteniendo alto alineamiento molecular.⁴ En base a estos principios de diseño, se reportan dos moléculas basadas en azobenceno y piridina con propiedades de CL para autoensamblar con moléculas portadoras de un yodoarilo.

Resultados y discusión

En la figura 1, se presenta la estrategia de diseño para obtener las azopiridinas hidrocarbonadas y presencia del grupo toloano.

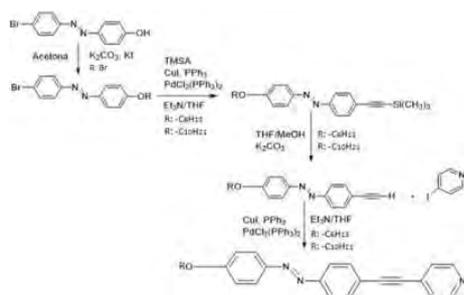


Figura 1: Metodología de diseño para obtener las azopiridinas AzoPyC₆ y AzoPyC₁₀.

Las azopiridinas carecen del grupo toloano, quien le confiere rigidez a la molécula. Se varió la longitud de la cadena alquílica y demostró que, al aumentar ésta, de manera homóloga lo hace la estabilidad de las mesofases y tiene un efecto significativo sobre la temperatura inicial de degradación (T_d).

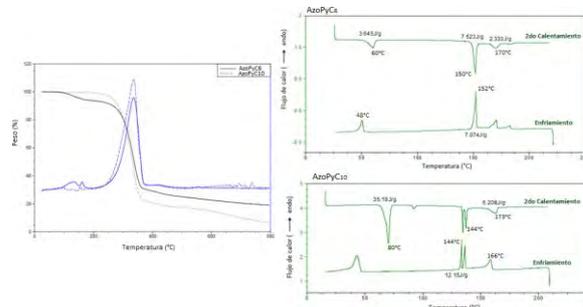


Figura 2: Termogramas (TGA) y (DSC) de las azopiridinas.

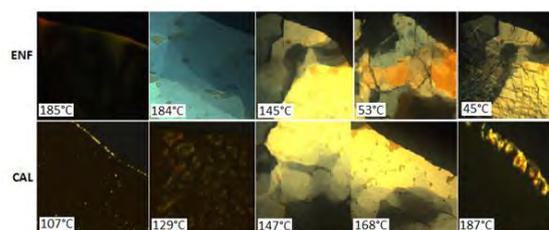


Figura 3: Micrografías obtenidas para la AzoPyC₆.

Conclusiones

Se diseñaron azopiridinas moleculares altamente conjugadas por la presencia del grupo toloano, que presentan potencial como base en el diseño de complejos moleculares y poliméricos líquido-cristalinos autoensamblados vía puente de halógeno. Su estructura química se verificó empleando RMN de ¹H y FTIR. Son térmicamente estables; presentaron propiedades de CL y un comportamiento mesomórfico complejo. POM reveló texturas de tipo nemática y esmécticas lisas y rugosas, atribuidas preliminarmente a mesofases SmA y SmE, respectivamente.

Referencias

- Sun, HJ, Zhang, S, Percec, V, *Chem. Soc. Rev.*, **2015**, 44(12): 3900-23.
- Chen Y, Yu H, Zhang L, Yang H, Lu Y, *Chem Commun* **2014**, 50: 9647.
- Fernandez F, Mikko P, Saccone M, Siiskonen A, Terraneo G, Resnati G, Ikkala O, Metrangolo P, Priimägi A, *Chem of Materials*, **2016**, 28(22): 8314-8321.
- Castro C, V, Cristales líquidos poliméricos foto-activos ensamblados vía puente de halógeno, Centro de Investigación en Química Aplicada, tesis de maestría, **2017**, 67-108.

ESTUDIO ESTRUCTURAL DE 2-AZACHALCONAS COMO POSIBLES SEMI-CONDUCTORES ORGÁNICOS.

Pablo Labra-Vázquez,^a Rosa Santillán^b y Norberto Farfán^{a*}

^aFacultad de Química, Departamento de Química Orgánica, Universidad Nacional Autónoma de México, 04510 México D.F., ^bDepartamento de Química, Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del IPN, Apdo. Postal 14-740, 07000, México. México. norberto.farfan@gmail.com

Introducción

Las chalconas son una familia de compuestos de origen natural y sintético que poseen un carbonilo α,β -insaturado típicamente conectado en ambos extremos a anillos aromáticos. Sus análogos nitrogenados, llamados *azachalconas*,¹ tienen una estructura molecular similar en la que uno de los anillos aromáticos posee un nitrógeno anular sp^2 , es decir un anillo de piridina. En contraste a la extensa investigación sobre chalconas y sus aplicaciones en óptica,² por ejemplo en materiales ópticos no lineales (ONL) de alta eficiencia,³ las propiedades foto-físicas de las azachalconas⁴ o de compuestos estructuralmente relacionados,⁵ están pobremente exploradas.

Como una continuación de nuestros estudios sobre las características electrónicas de esta familia de compuestos,⁴ en este trabajo se presenta un estudio teórico-experimental de una serie de 2-azachalconas que poseen diversos anillos heteroaromáticos y diferentes grupos funcionales. Se presenta un análisis sistemático del empaquetamiento cristalino de estos compuestos, correlacionándolo con las interacciones supramoleculares asociadas a los grupos funcionales presentes en cada estructura.

Resultados y discusión

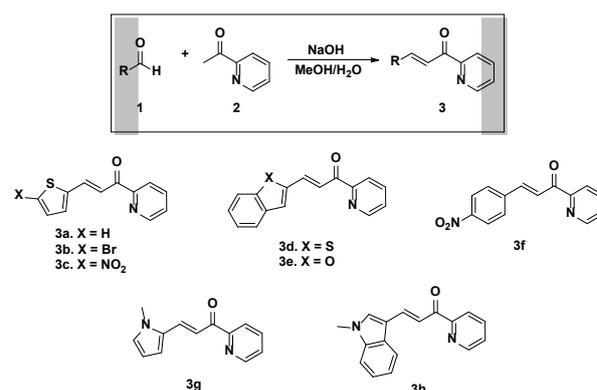
El tratamiento de aldehídos aromáticos (**1a-h**) con 2-acetilpiridina (**2**) en condiciones básicas dio lugar a las 2-azachalconas correspondientes (**3a-h**) con buenos rendimientos.

Fue posible obtener cristales adecuados para estudios de difracción de Rayos-X de monocristal para todos los compuestos (**3a-h**), observándose la formación de diversos sintones supramoleculares, siendo uno muy común los enlaces de hidrógeno cíclicos entre dos enonas adyacentes con descriptores $R_2^2(10)$ (Figura 1).

Conclusiones

Se estudió la estructura de diversas 2-azachalconas mediante experimentos de difracción de Rayos-X de monocristal y métodos teóricos (DFT). Los resultados muestran diversos motivos

supramoleculares comunes, como la formación de enlaces de hidrógeno cíclicos $R_2^2(10)$ y apuntan hacia posibles aplicaciones para estos compuestos como semiconductores orgánicos.



Esquema 1. Síntesis de las 2-azachalconas **3a-h**.

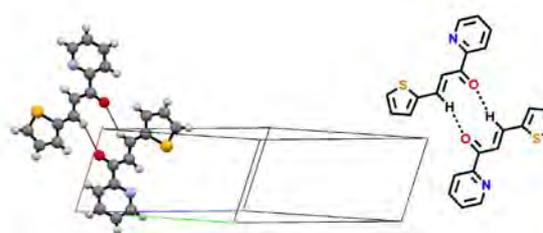


Figura 1. Formación de motivos $R_2^2(10)$ en la estructura cristalina de **3a**.

Referencias

- Marvel C. S.; Coleman L. E.; Scott G. P., *J. Org. Chem.* **1955**, *20*, 1785-1792.
- Zhuang C.; Zhang W.; Sheng C.; Zhang W.; Xing C.; Miao Z., *Chem. Rev.* **2017**, *117*, 7762-7810.
- a) Kumar P. C. R.; Ravindrachary V.; Janardhana K.; Manjunath H. R.; Karegouda P.; Crasta V.; Sridhar M. A., *J. Mol. Struct.* **2011**, *1005*, 1-7; b) D'silva E. D.; Podagatlapalli G. K.; Rao S. V.; Rao D. N.; Dharmaprakash S. M., *Cryst. Growth Des.* **2011**, *11*, 5362-5369.
- Labra-Vázquez P.; Lugo-Aranda A. Z.; Maldonado-Domínguez M.; Arcos-Ramos R.; Carreon-Castro M. d. P.; Santillán R.; Farfán N., *J. Mol. Struct.* **2015**, *1101*, 116-123.
- Fayed T. A., *Chem. Phys.* **2006**, *324*, 631-638.

ESTABILIDAD DE DICARBOXILATOS DE ESTAÑO POR RMN ^{119}Sn

Juan Carlos Martínez García, José Ángel Rojano Molina,

Raúl Villamil Ramos, Ana María Areli Morales Fuentes, Jorge Antonio Guerrero Álvarez*,

Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Centro de Investigaciones Químicas IICBA.

Av. Universidad No.1001 Col. Chamilpa C.P. 62210 Cuernavaca, Morelos, México

e-mail: jguerrero@uaem.mx.

Introducción

Hoy en día, hay un gran interés en el diseño de moléculas capaces de interactuar o reconocer selectivamente: iones, cationes o moléculas neutras¹. Los aniones típicamente forman complejos con metales, cuya estabilidad puede variar dependiendo de las características electrónicas del ligando y del centro metálico. El metal proporciona un sitio de enlace y la selectividad podría estar asociada con las características geométricas y estéricas del ligante².

Debido a que en trabajos previos de nuestro grupo de investigación analizamos la estabilidad de DTC de estaño hexacoordinados y pentacoordinados en medio ácido, encontrando propiedades interesantes en estos sistemas; en el presente trabajo se propone estudiar la estabilidad de dicarboxilatos coordinados con átomos de estaño³ en medio ácido (HCl), así como compuestos mixtos formados por dicarboxilato-ditiocarbamato de estaño, figura 1.

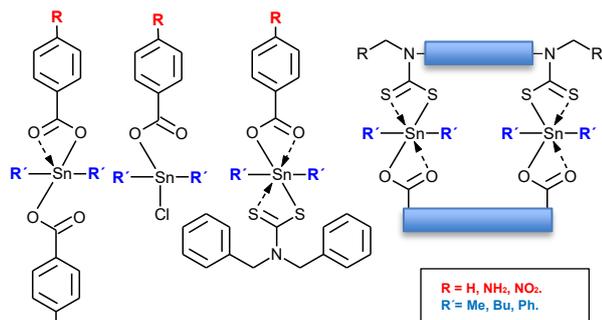


Figura 1.- Estructuras de compuestos de organoestaño(IV).

Resultados y discusión

Preparación y caracterización espectroscópica

La preparación de los carboxilatos de organoestaño (IV), se realizó a partir del método aplicado por Szorcsik⁴. La caracterización hasta el momento se ha realizado por técnicas espectroscópicas como infrarrojo (IR), RMN de ^1H , ^{13}C , ^{119}Sn y espectrometría de masas.

Estabilidad de complejos.

En la figura 2 se muestra una serie de espectros de RMN ^{119}Sn , en donde en el punto 1:0 hay una señal en -149.8 ppm. Al agregar 1 equivalente de HCl (1:1) comienza a aparecer una nueva señal en -30.7 ppm,

mientras que con 2 equivalentes de ácido se observa solo la señal de -30.7 ppm. Estos nos indica que el sistema pasa de una especie pentacoordinada (-149.8 ppm) a un tetracoordinada (-30.7 ppm), según la literatura. Además, el agregar un equivalente de NaOH como base, parte del sistema precipita y se observa que la señal en -30.7 ppm se hace ancha.

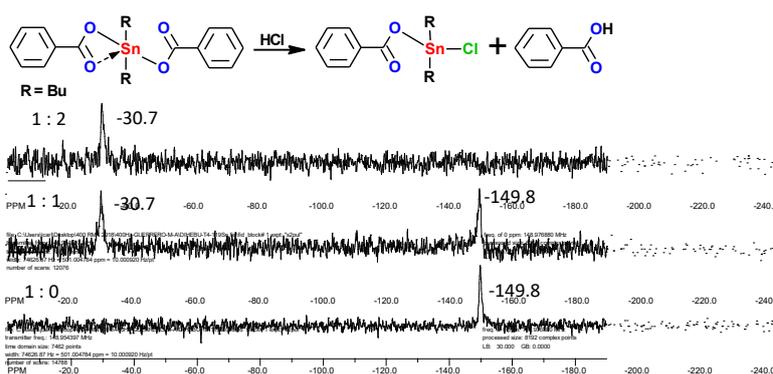


Figura 2.- Serie de RMN ^{119}Sn de estabilidad en medio ácido de Dicarboxilato DIHEBU.

Conclusiones

Se observó que los complejos de dicarboxilato no son estables en HCl, además que los grupos R' sobre el estaño (Me, Bu, y Ph), así como que los grupos R del carboxilato no les confieren estabilidad a los complejos, pero si pueden influir en la velocidad de descomposición.

Los autores agradecen el apoyo de CONACYT por la beca otorgada (no. 627805) y la RED de Temática de Química Supramolecular

Referencias

1. B. Chen, S. Xiang, G. Qian, Acc. Chem. Res., 2010, 43, 1115.
2. Bianchi, K. Bowman-James, E. García-España (Eds.), Supramolecular Chemistry of Anions, Wiley-VCH, New York, 1997.
- 3.a) J. Holecck; M. Nádovnik; K. Handlír; A. Lycka; J. Organomet. Chem.; 1983, 241,177; b) R. Hani; R. A. Geanangel; Coord. Chem. Rev.; 1982, 44, 229.
4. Deacon, G. B., & Phillips, R. J., Coordination Chemistry Reviews, 1980, 33(3), 227-250.

DITIOCARBAMATOS DE ESTAÑO COMO SISTEMAS REVERSIBLES EN MEDIO ACIDO-BÁSICO

José Ángel Rojano Molina, César Santiago Bello Barrios, Ana María Areli Morales Fuentes, Juan Carlos Martínez García, Jorge Antonio Guerrero Álvarez *

Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Centro de Investigaciones Químicas IICBA.
Av. Universidad No.1001 Col. Chamilpa C.P. 62210 Cuernavaca, Morelos, México.
e-mail: jguerrero@uaem.mx

Introducción

En la actualidad los DTC's tienen una gran importancia ya que se emplean en miles de productos de la vida diaria, por lo que son ampliamente estudiados [1]. Su baja estabilidad en medio ácido se ha indicado como una limitación mayor para este tipo de compuestos [2], por esta razón se realiza el análisis de la descomposición y/o estabilidad de complejos de DTC's de estaño (IV) penta- y hexacoordinados en medio ácido-básico.

Resultados y discusión

Se analizó la estabilidad de DTC de estaño derivados de monoamina y diaminas, generando especies monoméricas y diméricas (macrociclos).

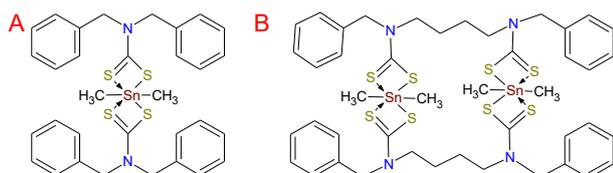


Figura 1: DTC de estaño analizados

En el análisis por UV se observa una banda en 260 nm característica de los DTC's hexacoordinados, que durante la primera adición 1:1(DTC-HCl) da origen a la banda de 250 nm perteneciente a DTC's pentacoordinados, que posteriormente mediante la adición de 1 equivalente KOH regresa al origen.

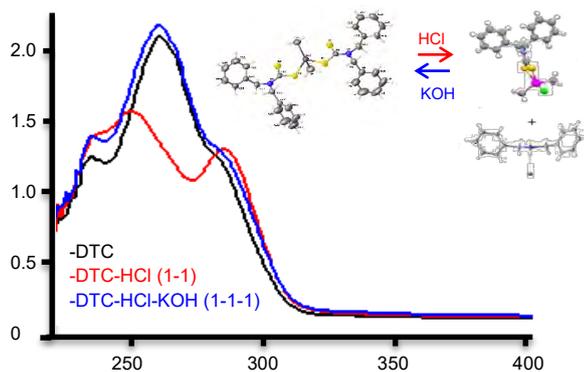


Figura 2: UV-Vis del compuesto DTC-DiBA-Me

Tabla 1: Desplazamientos de RMN de ^1H y ^{119}Sn en ppm.

DTC-HCl Relación Molar	δ Aromático	δ A1	δ A2	δ B1	δ B2	δ C1	δ ^{119}Sn	
							Hexa	Penta
1:0	7.3 – 7.2	5.22	1.7	---	---	---	-338.5	---
1:1	7.3 – 7.2	5.23	1.71	4.99	1.42	5.1	-338.3	-198.8
1:2	7.3 – 7.2	---	---	5.01	1.42	5.13	---	-199.9
1:2:2 DTC:HCl:KOH	7.3 – 7.2	5.24	1.69	---	---	---	-337.8	---

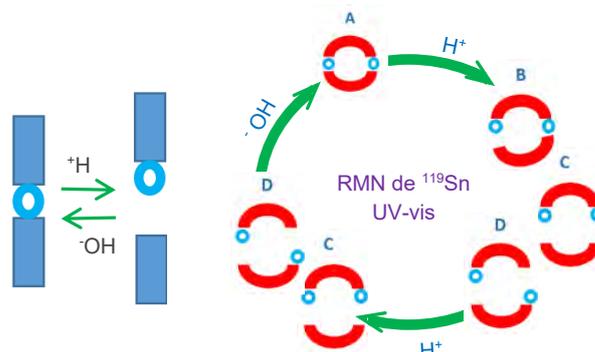


Figura 3: Proceso reversible del DTC de estaño

La reversibilidad de los sistemas fue analizada por UVvis, RMN de ^{119}Sn y ^1H .

Conclusiones

La estabilidad en medio ácido de los DTC's hexacoordinados es baja y se descompone a un compuesto pentacoordinado, sin embargo, al adicionar una base (KOH) la reacción es reversible. El proceso de reversibilidad también se observó en macrociclos, por lo que los hace sistemas interesantes para la inclusión de moléculas.

Los autores agradecen el apoyo de CONACYT por la beca otorgada (no. 627787) y la RED de Temática de Química Supramolecular.

Referencias

1. Ferreira, I. P., de Lima, G. M., Paniago, E. B., Pinheiro, C. B., Wardell.
2. Hadjikostas, C. C., Katsoulos, G. A., & Shakhathreh, S. K. (1987). *Inorganica chimica acta*, 133(1), 129-132.

ELABORACIÓN DE BIOPELÍCULA INDICADORA DE pH A BASE DE GELATINA Y JAMAICA

Carlos Lizárraga^a, Hisila Santacruz^b

^aDepartamento de Ciencias Químico Biológicas, Universidad de Sonora, Hermosillo, México; ^bDepartamento de Investigación Polímeros y Materiales, Universidad de Sonora, Hermosillo, México.

charlyliz19@gmail.com

Introducción

El pH (potencial de Hidrógeno) es una medida de la cantidad de iones hidrógenos positivos, en una solución determinada. La escala de pH se maneja desde 1 hasta el 14, en donde los valores 1 a 6 indican acidez, el valor de 7 es un punto neutro, y los valores desde 8 a 14 se consideran indicadores de basicidad². Entre los componentes presentes en los cálices y cálculos de la "flor de jamaica", pueden destacarse la presencia de tres tipos de compuestos principales: los antocianos, los polisacáridos y los ácidos orgánicos, entre otros³. Los cálices y cálculos presentan un intenso color rojo, producto de la presencia de dos antocianos en mayor proporción como se muestra en la (Figura 1).

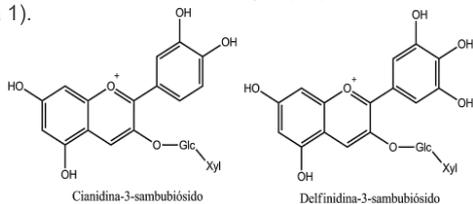


Figura 1. Antocianinas de mayor proporción

Para inmovilizar colorantes naturales de pH, se han estudiado una serie de polímeros naturales, biodegradables, y con buenas propiedades de gelificación en bajas concentraciones, el agar es un polímero para el desarrollo de espumas, películas y recubrimientos, por otro lado el almidón, es un polisacárido natural que se encuentra en las plantas, compuesto de amilosa y amilopectina. Ambos se han considerados como agentes prometedores para futuros materiales. Con el fin de mejorar las propiedades físicas de estos polímeros, se añadió agar a las películas de almidón¹, sus diferencias estructurales tienen que ser considerados, ya que el agar es una estructura fibrosa y el almidón es una estructura granular lo que forma una biopelícula estable.

Resultados y discusión

Resultados del UV-vis

Se observa en los espectros cambio en la posición de la banda de absorción indicativo de la variación de pH donde se nota el cambio de color de la solución con extracto de jamaica. (Figura 2).

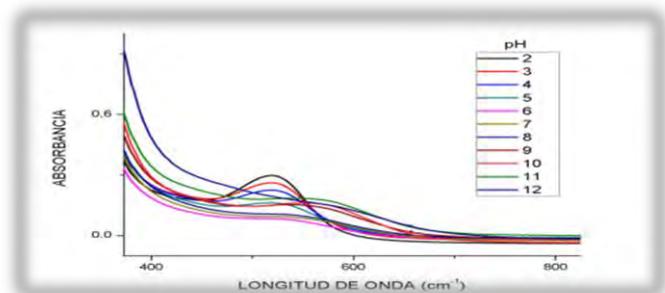


Figura 2. Resultados de UV-Vis y degradación de la molécula de antocianina según el cambio de pH.

Caracterización por FT-IR

Se realizaron espectros del material de partida: almidón, gretetina o gelatina, la película con y sin extracto de jamaica y al extracto de jamaica en polvo, que se dejó secar por 24 horas para obtener el polvo del compuesto. Como resultado dieron los siguientes parámetros (figura 3).

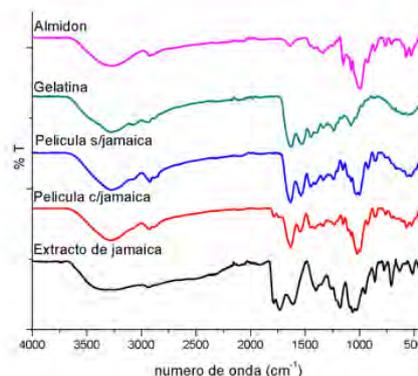


Figura 3. Resultados por FT-IR.

Aplicación de la película como indicador de frescura

Se pudo observar que la película se mantuvo en óptimas condiciones con el alimento con la muestra que estaba en la temperatura de conservación, mientras que la muestra al no tener las condiciones adecuadas se fue deteriorando igual que la película, esta fue cambiando de color gracias al ambiente de humedad con una ligera basicidad, dado a las bases volátiles nitrogenadas que se producen en alimento en descomposición elevando el pH en la película una coloración opaca amarillenta, indicativo que el producto cárnico no está en condiciones adecuadas para consumir.

Conclusiones

La película se puede utilizar para determinar la frescura de alimentos cárnicos. Esta película puede ser de gran interés para la industria alimentaria, ya que todos los materiales utilizados son biodegradables y no tóxicos.

Referencias

- Choi, I. et al. 2011. Intelligent pH indicator film composed of agar/potato starch and anthocyanin extracts from purple sweet potato.
- Khan, 2011, Analytical Applications of Plant Extract as Natural pH Indicator.
- Ramírez Rodríguez,, 2011. Physicochemical and Phytochemical Properties of Cold and Hot Water Extraction from Hibiscus sabdariffa.

ESTUDIO ESTRUCTURAL DE DERIVADOS BODIPY CON POSIBLE APLICACIÓN COMO SONDAS FLUORESCENTES.

Luis Sánchez-Sánchez,^a Pablo Labra-Vázquez,^a Rosa Santillan^b y Norberto Farfán^{a*}

^aFacultad de Química, Departamento de Química Orgánica, Universidad Nacional Autónoma de México, 04510 México D.F., ^bDepartamento de Química, Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del IPN, Apdo. Postal 14-740, 07000, México. México. norberto.farfán@gmail.com

Introducción

Los 4,4-difluoro-4-borata-3a-azonia-4a-aza-s-indacenos, comúnmente abreviados BODIPYs, han ganado reconocimiento como una familia de compuestos muy versátil que ha encontrado gran número de aplicaciones entre los químicos, bioquímicos y físicos.¹ Han sido reconocidos por sus excelentes propiedades ópticas tales como altos coeficientes de absorción, rendimientos cuánticos de fluorescencia elevados y notable fotoestabilidad. Adicionalmente, la síntesis química directa y la robustez estructural han permitido el ajuste fino de las propiedades ópticas mediante variaciones estructurales.²

Como continuación de nuestras investigaciones sobre este tipo de pigmentos fluorescentes,³⁻⁵ nos hemos propuesto la obtención de BODIPYs que contengan grupos fácil y selectivamente reconocibles por las células, como lo es el indol, el residuo del triptófano. Se presenta un análisis sistemático del empaquetamiento cristalino de estos compuestos, correlacionándolo con las interacciones supramoleculares asociadas a los grupos funcionales presentes en cada estructura.

Resultados y discusión

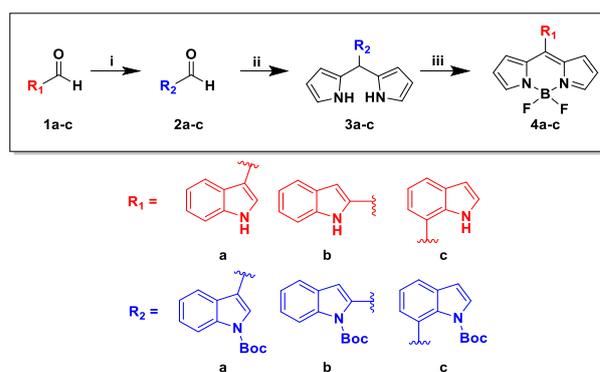
El procedimiento involucró la protección de formilindoles (**1a-c**) con Boc₂O en acetonitrilo, seguido por la condensación con pirrol en medio ácido, dando lugar a los dipirrometanos **3a-c**, que fueron finalmente oxidados con DDQ y coordinados con BF₃OEt₂, dando lugar a los compuestos deseados (**4a-c**) en rendimientos moderados. Se encontró que la síntesis del compuesto **4b** rindió en el último paso de reacción un isómero constitucional correspondiente estructura **4d** (Figura 1a). Es importante señalar que no hay análogos de BODIPY que posean un indol y un pirrol conectados mediante un puente de BF₂, como lo presenta el compuesto **4d**, por lo que su obtención parece representar un caso único.

Fue posible obtener cristales adecuados para la difracción de Rayos-X de monocristal para el compuesto **4a** (Figura 1b).

Conclusiones

Se exploró la síntesis de derivados BODIPY con un grupo indol (**4a-c**) empleando varios acercamientos sintéticos, sin embargo, se encontró que en las

condiciones de reacción se forma el compuesto **5d** esperados que fueron identificados mediante técnicas de RMN.



Esquema 1. Síntesis de los BODIPYs **4a-c**. Reactivos y condiciones: i) Boc₂O, DMAP, MeCN ii) Pirrol, CF₃COOH, iii) DDQ, CH₂Cl₂, BF₃OEt₂, Et₃N

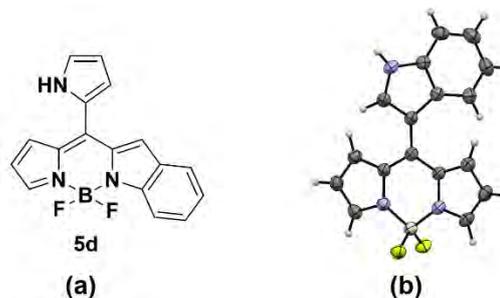


Figura 1. (a) Estructura molecular del compuesto **4d** y (b) Estructura cristalina del BODIPY **4a**.

Referencias

- Ziessel R.; Ulrich G., *New J. Chem.* **2007**, 31 (4), 496-501.
- Hattori S.; Ohkubo K.; Urano Y.; Sunahara H.; Nagano T.; Wada Y.; Tkachenko N.; Lemmetyinen H.; Fukuzumi S., *J. Phys. Chem. B* **2005**, 109, 15368-15375
- Xochitiotzi E.; Jiménez A.; García H.; Sánchez N.; Romero M.; Santillan R.; Farfán N., *New J. Chem.* **2016**, 40, 4500
- Corona R.; Arcos R.; Maldonado M.; Amelines O.; Jerezano A.; García H.; Rivera M.; Carreón M.; Farfán N., *Monatsh. Chem.* **2016**, 147, 1915-1923
- Xochitiotzi E.; Islas A.; García H.; Romero M.; Mendez J.; Carreón M.; *J. Organomet. Chem.* **2016**, 805, 148-157.

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE PARTÍCULAS POLIMÉRICAS DE ALTA SENSIBILIDAD

Chong-Canto Sayuri,^a Corea-Téllez M.^b y Padilla-Martínez I. I.^a

^aLaboratorio de Química Supramolecular y Nanociencias UPIBI-Instituto Politécnico Nacional. Av. Acueducto de Guadalupe S/N, col. Barrio la Laguna, 07340, Ciudad de México. ^bEdificio Z-6, ESQIE, Instituto Politécnico Nacional. San Pedro Zacatenco, Gustavo A. Madero. Ciudad de México.

another_sayuri_2341@hotmail.com

Introducción

En años recientes, el estudio de hidrogeles con ácido acrílico se han diversificado, dándole una mayor importancia al diseño de hidrogeles como acarreadores de fármacos.¹⁻³ El diseño de los hidrogeles se ha encaminado a fomentar la sensibilidad a diferentes estímulos como son la temperatura y el pH (polímeros inteligentes), para así crear sistemas de liberación controlada con diversos fármacos.⁴⁻⁶ Los polímeros que contienen grupos ácido carboxílico, tales como poli (ácido acrílico) (PAA) y poli (ácido metacrílico) (PMAA), presentan transiciones de protonación-desprotonación dependientes del pH y tienen la capacidad de inhibir la bioactividad de enzimas en el aparato gastrointestinal.⁷⁻⁹ En este trabajo se sintetizaron micropartículas inteligentes con metacrilato de metilo funcionalizado con ácido acrílico y reticulados con dimetacrilato de etilenglicol (PAA-PMA-EDGM) para lograr niveles de funcionalización de 20 y 25% y varios grados de reticulación 0, 0.1, 0.3 y 05. La estructura del polímero sintetizado se muestra en la Figura 1.

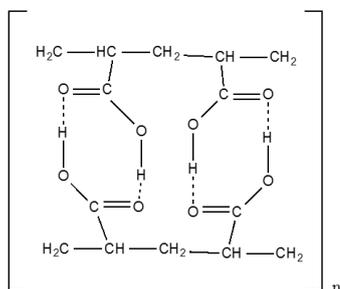


Figura 1. Estructura propuesta de los hidrogeles.

Resultados y discusión

Se obtuvieron un total de 8 emulsiones poliméricas (látex) con un diámetro promedio de partícula de 300 a 400 nm y un pH aproximado de 3.0, y un potencial z de -40 mv.

Se realizaron mediciones de diámetro de partícula a diferentes pH para demostrar la actividad pH-

sensible de estas micropartículas, a medida que se aumenta el pH, las partículas se van hinchando. Este procedimiento se realizó con todos los látex a pH de 3, 4, 6, 8, y 10.

Las isotermas de absorción tipo BET. mostraron que las micropartículas se comportan como materiales mesoporosos, con áreas superficiales entre 10-12 cm²/g y el tamaño de poro 6.5 nm.

Conclusiones

Se lograron sintetizar dos series de látex con dos diferentes grados de funcionalización y diferentes grados de entrecruzamiento. La micropartículas fueron liofilizadas, para obtener sus áreas superficiales de entre 10-12 cm²/g y el tamaño de poro 6.5 nm. Los látex presentan un comportamiento sensible al pH e hinchamiento a pH cercano a 6 y 8 también se detectó que el potencial Z se ve afectado por el pH, dando valores de cercanos a 0.

Referencias

1. Cordoba A. C.; Collins E. S.; Passeggi G. C. M.; Vaillard E. S.; Gugliotta M. L.; Minari J. R.; *Crosslinkable acrylic-melamine latex produced by miniemulsion polymerization*; Progress in Organic Coatings; 2018; 118; 82-90.
2. Gao, X.; He, C.; Xiao, C.; Zhuang, X.; Chen, X., "Synthesis and characterization of biodegradable pH-sensitive poly(acrylic acid) hydrogels crosslinked by 2-hydroxyethyl methacrylate modified poly(L-glutamic acid)", Materials Letters , Vol. 77, 2012, pp. 74–77.
3. Lowman, A.M.; Peppas, N.A. "Hydrogels" in: Encyclopedia of Controlled Drug Delivery, Vol. 1, Mathiowitz, E., Ed., John Wiley & Sons, New York, pp. 397-418.
4. Escobar, J.L.; García, D.M.; Zaldivar, D.; Katime, I. Rev. Iber. Polim., Vol. 3, 2002, pp. 1-15.
5. Yong Qiu, K.P. Advanced Drug Delivery Reviews, Vol. 53, 2001, pp. 321-339.
6. Siegel, R. A.; Falamarzian, M.; Firestone, B.A.; Moxley, B. J. Control. Rel. Vol 8, 1988, pp. 179-182.
7. García, D.M.; Escobar, J.L.; Bada, N.; Casquero, J.; Hernández, E.; Katime, I. Eur. Polym. J, Vol 40, 2004, pp. 1637-1643.
8. García, D.M.; Escobar, J.L.; Noa, Y.; Bada, N.; Hernández, E.; Katime, I. Eur. Polym. J, Vol 40, 2004, pp. 1683-1690.
9. Peppas, N.A.; Bures, P.; Leobandung, W.; Ichikawa, H. Eur. J. Pharm. Biopharm, Vol 50, 2000, pp. 27-46.

DERIVADOS DEL ALCALOIDE TETRANDRINA COMO POSIBLES SONDAS DE ADN PARA MICROSCOPIA DE FLUORESCENCIA

Sandra González Martínez^a, Ramón Ñíguez Palomares^b, María A. Islas Osuna^c y Karen Ochoa Lara^a

^aDepartamento de Investigación en Polímeros y Materiales, Universidad de Sonora, Hermosillo, Son. México;

^bDepartamento de Física, Universidad de Sonora, Hillo., Son. México; ^cCentro de Investigación en Alimentación y Desarrollo A. C., Hermosillo, México. makkih@gmail.com; karenol@polimeros.uson.mx

Introducción

Una herramienta importante en la bioquímica y biología celular son las técnicas microscópicas de fluorescencia. Estas técnicas permiten observar procesos como la división celular, identificar organelos o localizar proteínas dentro de algún tipo celular en particular. En la mayoría de los casos, se requiere de moléculas fotoluminiscentes, llamadas sondas, que permitan la visualización del blanco. Existe una amplia variedad de sondas fluorescentes para marcar ADN, sin embargo, la mayoría de ellas son impermeables a la membrana celular, citotóxicas o inespecíficas. Lo anterior limita su aplicación, sobre todo en células vivas¹. En este proyecto se propone estudiar la unión de seis derivados de tetrandrina con ácidos nucleicos, así como su fluorescencia y permeabilidad a la membrana celular, con el fin de evaluar su potencial uso como sondas fluorescentes de ADN en la microscopía de fluorescencia.

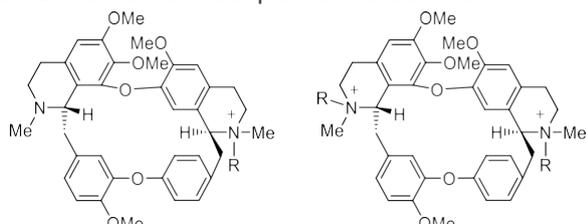


Figura 1. Estructura de la S,S-(+)-tetrandrina. Los derivados se sintetizaron cuaternizando uno (izquierda) o los dos nitrógenos (derecha) con los sustituyentes indicados en la tabla 1.

Resultados y discusión

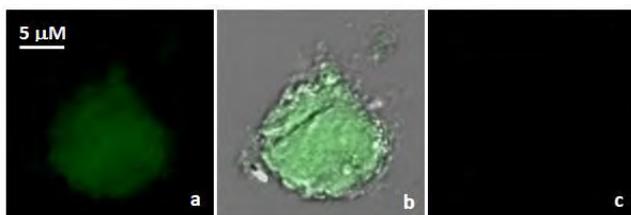


Figura 2. Complejo ADN con el derivado Bis-Pireno 5 M observado en el microscopio confocal. El panel a corresponde a la imagen de fluorescencia, b es el traslape de fluorescencia y campo claro, mientras que c es la imagen de fluorescencia del derivado Bis-Pireno sin ADN. ADN = 5'-GTA AGA TGA TTC-3' and 5'-GAA TCA TCT TAC-3'.

Tabla 1. Constantes de Stern-Volmer (K_{SV}) para los complejos de los derivados de tetrandrina con ADN, en 10% DMSO/buffer de fosfatos (pH = 7.2 y 0.01 M NaCl).

Derivado	$K_{SV} (M^{-1})$
Bis-Naftilo	16,930
Bis-Antraquinona	144,565
Bis-Pireno	41,177
Bis-Indol	52,140
Mono-Acridina	64,000 ²
Mono-Antraceno	46,000 ²

Conclusiones

Se demostró la interacción entre los derivados de tetrandrina estudiados y el ADN de doble cadena, con alta afinidad. Los derivados Bis-Pireno, Mono-Acridina y Bis-Indol presentan emisión tras su unión con ADN de doble cadena al ser excitados a $\lambda = 488$ nm. No se encontró emisión significativa de los derivados por sí solos ni autofluorescencia del ADN. Los resultados obtenidos a la fecha indican que los compuestos son buenos candidatos para ser aplicados como sondas fluorescentes de ADN.

Referencias

- Haustein, E., Schwille, P. *HFSP Journal*, 2007, 1, 169.
- Calvillo-Páez et al. *Chem. Biol. Interact.*, 2018, 286, 34–44.

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE BODIPYS ACOPLADOS A CARBORANOS CON POTENCIALES APLICACIONES COMO MATERIALES SEMICONDUCTORES

Aylin Sinai Galindo-Hernández^a, Pablo Labra-Vázquez^a, Rosa Santillán^b y Norberto Farfán^{a*}

^a Facultad de Química, Departamento de Química Orgánica, Universidad Nacional Autónoma de México, 04510 México D.F., ^b Departamento de Química, Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del IPN, Apdo. Postal 14-740, 07000, México. México. norberto.farfán@gmail.com

Introducción

La terapia por captura neutrónica de boro (BNCT, por sus siglas en inglés) representa una estrategia novedosa para el tratamiento contra cáncer que brinda una manera de destruir selectivamente células tumorales sin dañar el tejido normal circundante mediante la reacción de fisión ilustrada en el Esquema 1.¹



Esquema 1. Mecanismo de muerte celular que emplea la terapia por captura neutrónica en boro.

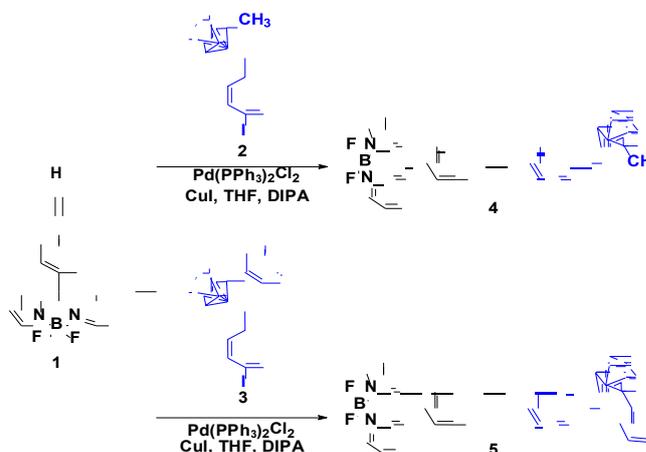
Debido a sus altos contenidos en boro (~75%) y sus tamaños reducidos (usualmente menores a 500 Da), los carboranos (agrupaciones moleculares de boro-carbono poliédricas) representan buenos candidatos para emplearse en BNCT.² Además, son compuestos extraordinariamente robustos con propiedades deseables tales como estabilidad térmica y redox, inercia química, baja nucleofilia y alta hidrofobicidad, haciéndolos atractivos para varias aplicaciones como nanomateriales, electrónica molecular, catálisis, química ambiental y otras áreas.³

Por otra parte, es importante mencionar que los derivados del boro-dipirrometano (BODIPYs) tienen aplicaciones como películas emisoras de luz y semiconductores orgánicos.⁴

En este trabajo se presenta la síntesis de derivados de BODIPYs acoplados a carboranos con la intención de obtener compuestos químicamente robustos con aplicaciones como semiconductores orgánicos

Resultados y discusión

A partir del *meso*-(4-etinilfenil)-BODIPY (1), se realizaron reacciones de acoplamiento cruzado tipo Sonogashira con los 1,2-*closo*carboranos (2-3), para rendir los compuestos objetivo 4-5 (Esquema 2).



Esquema 2. Ruta sintética para la obtención de los compuestos objetivo 4-5.

Conclusiones

Se estudió la estructura cristalina de los compuestos 4-5 mediante experimentos de difracción de Rayos-X de monocristal, que mostró apilamientos π - π extendidos, lo cual puede permitir una aplicación como semiconductores orgánicos. Además, la presencia de los cúmulos de boro puede otorgarles elevada estabilidad térmica y otras aplicaciones como por ejemplo en terapia por captura neutrónica en boro (BNCT) y microscopía de fluorescencia.

Referencias

1. Grimes R. N., *Carboranes*, 2a Ed., Academic Press, 2011.
2. Heller G.; Meller A.; Onak T., "Boron Compounds: Boron and Cl, Br, I, S, Se, Te, Carboranes" en *Gmelin Handbook of Inorganic Chemistry B*, Springer, 1988, 1-20 pp.
3. Núñez R.; Tarrés M.; Ferrer-Ugalde A.; Fabrizi de Biani F.; Teixidor F., *Chem. Rev.* **2016**, *116*, 14307-14378.
4. Corona-Sánchez R.; Arcos-Ramos R.; Amelines-Sarria O.; Jerezano-Domínguez A.; García-Ortega H.; Rivera M.; Carreón-Castro M. del P.; Farfán N. *Monatsh Chem.* **2016**, *147*, 1915-1923.

INTERACCIÓN MOLECULAR DE EGCG Y RESVERATROL CON NANOPARTÍCULAS DE ORO Y PLATA

Blanca Esthela Rodríguez Vázquez^a, Rosa Elena Navarro^a Ericka Rodríguez León^b Ramón Alfonso Íñiguez Palomares^b

^aDepartamento de Polímeros y Materiales, Universidad de Sonora, Hermosillo, México; ^bDepartamento de Física, Universidad de Sonora, Hermosillo, México correo: brdgz16@gmail.com

Introducción

En los últimos años las nanopartículas han sido sumamente utilizadas por el gran potencial de aplicación que presentan debido a su tamaño, sin embargo, la síntesis química tradicional hace uso de agentes no deseados en el producto final para algunas de estas aplicaciones¹, por lo que se han buscado otras rutas de síntesis evitando estos componentes. Es así como se propone la síntesis de nanopartículas de oro y plata a través de epigallo catequina gallato (EGCG) y resveratrol, mediante reacciones de óxido-reducción. Estas moléculas son de interés debido a que han sido reportadas como agentes anticancerígenos, antioxidantes y de utilidad para contrarrestar diversas enfermedades.^{2,3}

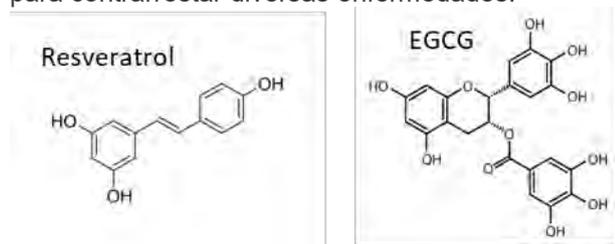


Figura 1. Muestra las estructuras de las moléculas de resveratrol y EGCG.

La síntesis de las nanopartículas se realizó utilizando AgNO_3 y HAuCl_4 y la caracterización mediante espectroscopia de UV-Vis, IR, RMN, Raman, Fluorescencia y TEM.

Resultados y discusión

Se establecieron a través de UV-Vis las mejores relaciones de reductor:precursor para llevar a cabo la síntesis de los nanomateriales, de acuerdo a lo reportado en la Tabla 1.

	Precursor Metálico	Reductor	Solvente 70:30 EtOH:H ₂ O
AgEGCG	500 μl	30 μl	2.47 ml
AgResv	500 μl	30 μl	2.47 ml
AuEGCG	500 μl	30 μl	2.47 ml
AuResv	500 μl	150 μl	2.35 ml

De la síntesis se obtuvieron nanopartículas que se caracterizaron mediante TEM, obteniéndose tamaños menores a los 10 nm, con morfologías cuasi esféricas. La interacción entre las moléculas y las sales precursoras se estudió mediante RMN de ¹H, donde se observa el desplazamiento de las señales cuando se compara la molécula pura contra las nanopartículas generadas por ella, como se muestra en la Figura 2.

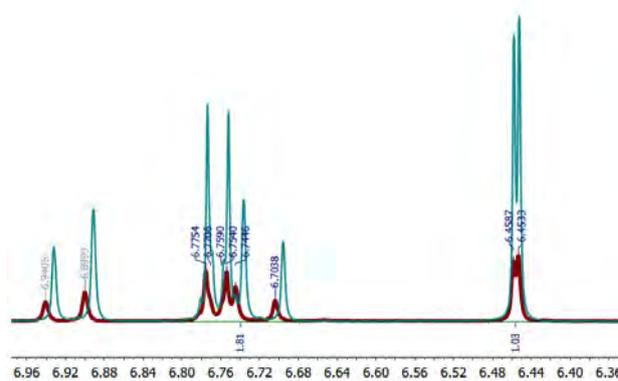


Figura 2

Conclusiones

La caracterización de las nanopartículas por las distintas técnicas nos permite ver que las señales de las nanopartículas se amplifican comparadas con las moléculas puras, además, mediante RMN se observa el cambio de δ que se produce en la molécula de resveratrol cuando reduce al AgNO_3 .

Referencias

- Mubayi, A., Chatterji, S., Rai, P. M., & Watal, G. (2012). Evidence based green synthesis of nanoparticles. *Adv Mat Lett*, 3(6), 519-525.
- Baur, J. A., & Sinclair, D. A. (2006). Therapeutic potential of resveratrol: the in vivo evidence. *Nature reviews Drug discovery*, 5(6), 493.
- Singh, B. N., Shankar, S., & Srivastava, R. K. (2011). Green tea catechin, epigallocatechin-3-gallate (EGCG): mechanisms, perspectives and clinical applications. *Biochemical pharmacology*, 82(12), 1807-1821.

ANÁLISIS ESTRUCTURAL DE UNA SERIE DE DERIVADOS DE TETRANDRINA Y LA INFLUENCIA DE SU ESTRUCTURA MOLECULAR EN EL AUTOENSAMBLAJE

Calvillo-Páez, Viviana,¹ Escobar-Picos, Raymundo,¹ Vásquez Ríos, María G.,² Sotelo-Mundo, Rogerio R.,³ Höpfl, Herbert,^{2*} y Ochoa Lara, Karen^{1*}

¹ Departamento de Investigación en Polímeros y Materiales, Universidad de Sonora, Hermosillo, Son., México.

² Centro de Investigaciones Químicas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos. Cuernavaca, Mor., México.

³ Centro de Investigación en Alimentos y Desarrollo A. C., Hermosillo, Son., México.

*hhopfl@uaem.mx, karenol@polimeros.uson.mx,

Introducción

Los materiales orgánicos porosos han ganado gran interés recientemente debido a su gran variedad de aplicaciones potenciales.¹ Estos sistemas se pueden modificar fácilmente para controlar sus propiedades.² Por otro lado, nuestro grupo de investigación ha reportado diversos derivados de la tetrandrina, los cuales han mostrado ser efectivos receptores para aniones de importancia biológica.³ Además, se ha observado que estos compuestos presentan auto-agregación en agua dependiendo de la estructura química, concentración y fuerza iónica. En este trabajo, se reporta la síntesis y el análisis estructural por difracción de rayos X de monocristal de una serie de derivados bis-alquilados de la S,S-(+)-tetrandrina.

Resultados y discusión

Los compuestos obtenidos se han caracterizado por técnicas convencionales. A la fecha se han elucidado las estructuras cristalinas de dos derivados. Como se puede observar en la tabla, a medida que varía el sustituyente, la molécula se agrega formando una celda unitaria de mayor tamaño e incluso es capaz de autoensamblarse. La estructura cristalina de **BNT** forma un nano-ensamble supramolecular esférico de 48 moléculas que se mantienen unidas por interacciones - , CH- y CH-O y con una cavidad del 15 % de su volumen total.

Tabla 1. Información cristalográfica de los compuestos.

Comp.	Tet ⁴	BMT ⁵	BBT	BNT
a (Å)	7.12371(10)	14.6592(3)	24.27507(18)	43.8716(2)
b (Å)	11.92092(16)	21.0211(4)	28.6715(2)	43.8716(2)
c (Å)	38.3027(2)	14.9397(3)	33.1633(3)	43.8716(2)
α (°)	90.00	90.00	90.00	90.00
β (°)	90.00	102.270(2)	90.00	90.00
γ (°)	90.00	90.00	90.00	90.00
V (Å ³)	3252.71(8)	4498.54(15)	23081.8(3)	84440.3(13)
Z	4	2	4	24
R ₁	0.0323	0.0536	0.0681	0.0662

Tet = tetrandrina, BMT = Tet bis-metilada, BBT = Tet bis-bencilada y BNT = Tet bis-naftilada.

Asimismo, se observa en un arreglo 2x2x2 que los ensamblajes de tipo esférico de **BNT** se encuentran

interconectados a través de poros en cada cara de la celda (Figura 1) y se forma una novena esfera en el centro de este arreglo.

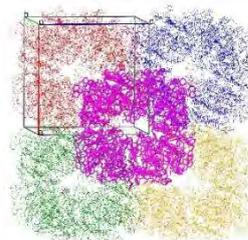


Figura 1. Arreglo 2x2x2 de la estructura cristalina de **BNT**.

Destaca que el ensamble de **BNT** es capaz de incluir al colorante Nile Red dentro de su estructura (en una proporción 101 **BNT**/Nile Red).

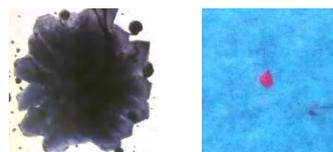


Figura 2. Fotografía del cristal de **BNT** con Nile Red en el microscopio óptico (izquierda) y bajo una lámpara de luz ultravioleta (derecha).

Conclusiones

Variar el sustituyente influye en la estructura cristalina de los derivados. Hasta nuestro conocimiento **BNT** puede ser considerada el nano-ensamble supramolecular más grande conocido a la fecha y dadas sus características tiene potencial aplicación para la encapsulación de huéspedes diversos tales como biomoléculas.

Referencias

- van Kuringen, H.P.C.; Schenning, A.P.H.J. In *Hydrogen Bonded Supramolecular Materials*, Li Z.-T.; Wu L.-Z., Springer, Lectures Notes in Chemistry 88; Springer, Germany, **2015**;
- Richert, C.; Krupp, F. *Synlett*, **2017**, 28, 1763-1766.
- Calvillo-Páez, V. *et al.*, *Chem. Biol. Interact.*, **2018**, 286, 34-44.
- Zhou, Z. *et al.*, *RSC Adv.*, **2014**, 4, 62586.
- Liégeois, J.-F.; Wouters, J.; Seutin, V.; Dilly, S. *Chem. Med. Chem.*, **2014**, 9, 737-740.

RECEPTORES BIS-UREA CON ESPACIADOR POLIÉTER PARA EL RECONOCIMIENTO DE ANIONES Y SALES

J. Martín Soto Cruz,^a Ramón A. Moreno Corral,^b P. Jancarlo Gómez Vega^b y Karen L. Ochoa Lara^{b*}

^aDepartamento de Ciencias Químico-Biológicas, Universidad de Sonora, Hermosillo, México; Departamento de Investigación en Polímeros y Materiales, Universidad de Sonora, Hermosillo, México. *karenol@polimeros.uson.mx

Introducción

El reconocimiento de pares iónicos por receptores heteroditópicos es un área de gran interés debido a sus múltiples aplicaciones, tales como el transporte a través de membranas, agentes para extracción de sales y sensores moleculares, entre otros.¹ Dentro del diseño de estos sistemas se han incorporado unidades urea o tiourea para reconocer a la especie aniónica, en combinación con calixarenos y éteres corona para el reconocimiento del catión.² Sin embargo, la obtención de estos receptores es complicada desde el punto de vista sintético. Por tal razón, nuestro grupo de investigación se ha enfocado al diseño de heteroditópicos acíclicos, los cuales se obtienen por rutas simples y con buenos rendimientos, y que presentan buena afinidad por diversos pares iónicos.³ En este trabajo se presenta la síntesis y caracterización de los receptores de la Figura 1. A la fecha, estos han sido evaluados como monotópicos de aniones, mediante UV/Vis y RMN de ¹H, en un sistema 90:10 MeCN:DMSO.

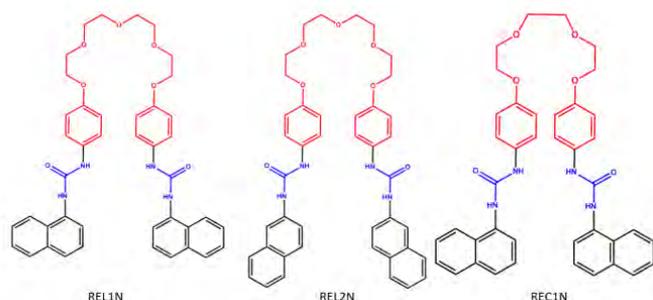


Figura 1. Estructuras químicas de los receptores.

Resultados y discusión

Los receptores y sus precursores fueron caracterizados por técnicas convencionales. También se han realizado estudios de reconocimiento molecular con estos y diversos aniones (ver Tabla 1).

Tabla 1. Constantes de asociación (*K*) para varios complejos receptor-anión por UV/Vis en un sistema 90:10 MeCN:DMSO.

Anión	<i>K</i> (M ⁻¹)		
	REL1N	REC1N	REL2N
CH ₃ COO ⁻	5.3 x 10 ⁴	2.1 x 10 ⁴	- ^a
H ₂ PO ₄ ⁻	5.6 x 10 ⁴	9.1 x 10 ³ ^b	9.0 x 10 ⁴
F ⁻	4.1 x 10 ⁴	1.0 x 10 ⁴ ^b	- ^a
PPi ⁻³	~8.6 x 10 ⁵	- ^a	- ^a

^a- Por determinar. ^b- Datos por confirmar.

Como se puede apreciar en la tabla, al comparar los valores obtenidos para REL1N y REC1N, se observa que el receptor REL1N presenta una mayor afinidad, lo cual revela la influencia del espaciador. Además, se observó una mayor afinidad por H₂PO₄⁻ y PPI⁻³, dada su basicidad y la carga. REL2N presentó una mayor afinidad por H₂PO₄⁻ en comparación a su análogo REL1N, evidenciando un efecto de la sustitución del grupo naftilo en la complejación. Sin embargo, aún falta estudiar a REL2N con el resto de los aniones.

Por otro lado, también se han realizado titulaciones mediante RMN de ¹H. Como ejemplo en la Figura 2 se presenta la gráfica de la dependencia del protón ureídico aromático de REL1N vs la concentración de H₂PO₄⁻, para este sistema se obtuvo una afinidad de 877.2 M⁻¹ por esta técnica.

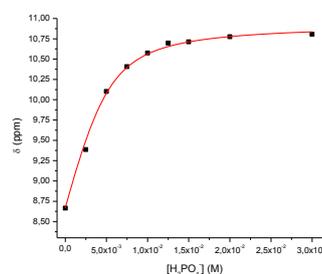


Figura 2. Dependencia de δ del protón ureídico aromático de REL1N con respecto a la concentración de H₂PO₄⁻ en un sistema 90:10 CD₃CN:DMSO-d₆.

Conclusiones

Hasta el momento se ha demostrado que los sistemas son buenos receptores de aniones. Estudios preliminares por espectrometría de masas y RMN de ¹H indican que los sistemas que contienen el espaciador poliéter de 5 oxígenos forman complejos con el catión Na⁺. Están por realizarse estudios en solución que determinen la capacidad de los receptores de interactuar con sales.

Referencias

1. McConnell & Beer, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2012**, 51, 5052-5061.
2. M ke Kalenius & Rissanen, *Inorg. chem.*, **2015**, 54, 9154-9165.
3. Gómez-Vega, et al, **2018**, sometido.

SIMPLE SYNTHESIS OF MIL-101 METAL-ORGANIC FRAME LOADED WITH Fe₃O₄ NANOPARTICLES FOR MAGNETIC REMOVAL OF CONGO RED

Antonio Tirado-Guizar^{1*}, William González-Gómez², Geonel Rodríguez-Gattorno², Francisco Paraguay-Delgado³ y Georgina Pina-Luis¹

¹Centro de Graduados e Investigación en Química, Instituto Tecnológico de Tijuana, A.P. 1166, Tijuana 22500, BC, México. ²Departamento de Física Aplicada, Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del Instituto Politécnico Nacional (CINVESTAV-IPN), Mérida, Yucatán 97310, México. ³Centro de Investigación en Materiales Avanzados S.C. Departamento de Física de Materiales, Av. Miguel de Cervantes 120, Complejo Industrial Chihuahua, CP 31109 Chihuahua, Chih., México. antonio.tirado@tectijuana.edu.mx

Introduction

Coordination polymers also known as metal organic frames (MOFs) are structures formed by extended metal-organic ligand bonds. These types of polymers can show 1D, 2D or 3D depending on the coordination number of the metal or the organic ligand structure. The 3D MOFs are coordination polymers that have high surface area and large pore size. Most of these MOFs can be easily dispersed in water, which makes them great to manipulate in biological or environmental applications. There have been reports that some MOFs prepared with Zn, Cr and Fe (MOF-200, MIL-101 and MIL-100) have surface area as high as 4000 m²/g.¹ In 2014 Hou² encapsulated Pt in a UiO-66 type MOFs which was applied for catalytic hydrogenation of olefins. In 2013 Qui³ reported a method to obtain MIL-100 type MOFs with magnetic nanoparticles for degradation of methylene blue by a simple route. In this work we show the preliminary results of the synthesis of different core-shell structures with magnetic nanoparticles-MOFs and their use for adsorption of Congo Red in water samples.

Results and discussion

The TEM micrograph of the MOF MIL-101 alone and a composite structure of the MIL-101/Fe₃O₄ were obtained. The results show that the MOF has an approximate size of 100 nm and the magnetic nanoparticles less than 10 nm. The XRD spectrum shows that the MOF and the magnetic nanoparticles were obtained with good purity, this was done comparing the XRD spectrum of the samples with a simulated XRD spectrum, no additional diffraction peaks were observed. These materials were applied to remove Congo Red from water samples. The pH was fixed at 5, 7 and 10. In pH 5 and 7, the adsorption had greater efficiency reaching more than

90% of removal. At pH 10, the efficiency was lower, reaching more than 80%. The amount of magnetic nanoparticles impregnated on the surface of the MOF was tested for the dye removal. The efficiency reached in three different amounts of magnetic nanoparticles did not have any difference, the samples have less than 4% of difference at the same pH. This proves that with a minimum amount of magnetic nanoparticles is enough to have great dye removal.

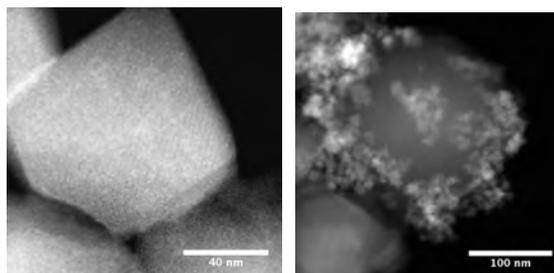


Figure 1. TEM micrographs of a) MOF MIL-101 and b) MIL-101/Fe₃O₄ nanoparticles.

Conclusion

The magnetic MOF obtained has great efficiency to remove Congo Red from water samples. The materials were obtained in a simple synthesis route. At pH 7 was reached the highest efficiency.

References

1. Férey, G.; Mellot-Draznieks, C.; Serre, C.; Millange, F.; Dutour, J.; Surble, S.; Margiolaki, I. *A Science* **2005**, 309, 2040.
2. Zhang, W.; Lu, G.; Cui, C.; Liu, Y.; Li, S.; Yan, W.; Xing, C.; Chi, Y.R.C.; Yang, Y.; Huo, F. *Mater.* **2014**, 26, 4056.
3. Zhang, C.; Qiu, L.; Ke, F.; Zhu, Y.; Yuan, Y.; Xu, G.; Jiang, X. *Mater. Chem. A* **2013**, 100, 14329.

ESTUDIO DE LA REACTIVIDAD DE COMPLEJOS REDUCTORES ESTEREOSELECTIVOS SOPORTADOS EN FASE SÓLIDA

Judas Vargas Durazo^a, Hisila Santacruz Ortega^a, Milagros Aguilar Martínez^b, Adrián Ochoa Terán^c y Juan Carlos Gálvez Ruíz^d

^a Departamento de Investigación en Polímeros y Materiales, UNISON, Hermosillo, Sonora, México.; ^b Departamento de Ciencias Químico Biológicas y Agropecuarias, UNISON, Caborca, Sonora, México.; ^c Centro de Graduados e Investigación en Química, ITT, Baja California, México ^d Departamento de Ciencias Químico Biológicas, UNISON, Hermosillo, Sonora, México. juan.galvez@unison.mx

Introducción

La síntesis orgánica en fase sólida (SOFS) es un método en el cual se utiliza una matriz polimérica como soporte para llevar a cabo reacciones químicas en ella¹. Se presenta la síntesis de veinticuatro complejos de tetrahidrobóratos alcalinos de la resina Merrifield (**M** y **m**) y Wang (**w**) y el acoplamiento de la amina bidentada 1,2-etilendiamina (**e**) con cuatro cetonas asimétricas (**a**, **b**, **c**, **d**). En la Figura 1 se muestra el esquema de síntesis de los nuevos complejos reductores estereoselectivos soportados en fase sólida y su empleo en la reducción enantioselectiva de acetofenona.

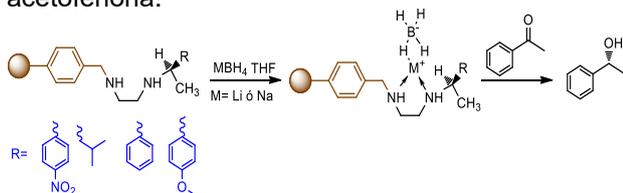


Figura 1. Esquema de síntesis de los complejos y reducción enantioselectiva de acetofenona.

Resultados y discusión

Los complejos reductores soportados en fase sólida fueron analizados por espectroscopía de FT-IR. La presencia del tetrahidrobóratato es denotada por la señal de estiramiento B-H a los 2380 cm^{-1} , indicando la presencia del complejo formado en la resina. En los espectros de fluorescencia, para la resina **meary** ($\lambda_{\text{ex}} = 350$ $\lambda_{\text{em}} = 437$) se observa el desplazamiento a mayor longitud de onda en el espectro de emisión en comparación con la resina quelante quiral; esto como consecuencia de la complejación del metal alcalino del tetrahidrobóratato a todos los sitios disponibles de la resina¹. (Figura 2). Se llevó a cabo la reducción del sustrato acetofenona, empleando los complejos reductores, analizando por medio de FT-IR observándose

selectividad a lo que según reportes corresponden al enantiómero S (Figura 3).

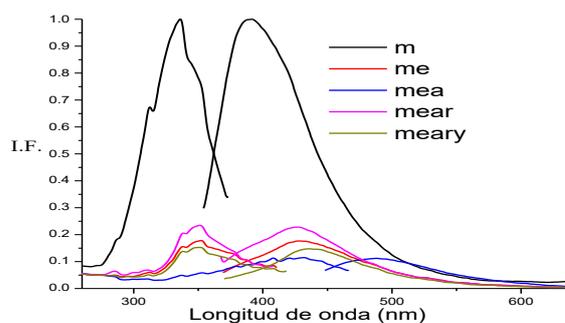


Figura 2. Espectros de excitación y emisión de la resina Merrifield y sus derivados.

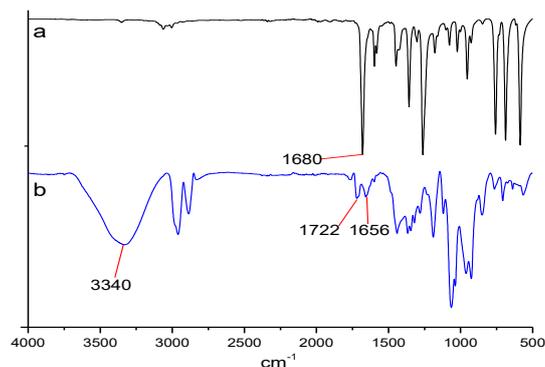


Figura 3. Espectro de FT-IR de la reducción de acetofenona (a) y la obtención de (S)-1-feniletanol (b).

Conclusiones

Se llevó a cabo la preparación de veinticuatro complejos de sodio y litio con rendimientos superiores al 86% así como la reducción del sustrato acetofenona.

Referencias

1. Aguilar-Martínez M.R., Vargas-Durazo J.T. Galvez-Ruiz J.C. Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie. **2013**;639(7):1166--1172.

APLICANDO LA SÍNTESIS DE ÍNDOLES DE LAROCK EN LA PREPARACIÓN DE BODIPYS CON POTENCIAL APLICACIÓN COMO SEMICONDUCTORES ORGÁNICOS

Cristian Axel Guzmán-Cedillo,^a Pablo Labra-Vázquez,^a Rosa Santillan^b y Norberto Farfán^{a*}

^aFacultad de Química, Departamento de Química Orgánica, Universidad Nacional Autónoma de México, 04510 México D.F., ^bDepartamento de Química, Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del IPN, Apdo. Postal 14-740, 07000, México. México. norberto.farfán@gmail.com

Introducción

Los derivados del boro-dipirrometeno (BODIPYS) son una familia de compuestos con propiedades interesantes entre las que destacan su gran estabilidad térmica y fotoquímica, así como sus elevados rendimientos cuánticos de fluorescencia, absorción intensa en el visible, entre otras. Es por esto que son utilizados como marcadores fluorescentes, capas activas en celdas fotovoltaicas, colectores solares y semiconductores.¹

Siendo esta última propiedad el área de interés, ya que estos núcleos poseen características únicas para dispositivos opto electrónicos, debido a que pueden ser depositados para producir películas delgadas; la cual es una forma de agregación útil para sistemas semiconductores, de igual forma las características moleculares intrínsecas, y el control de la morfología de la película delgada, son parámetros críticos en el rendimiento de los dispositivos opto-electrónicos.²

Partiendo del uso de esta familia de compuestos como sistemas opto-electrónicos, se propone estudiar las propiedades foto-físicas de BODIPYS que posean fragmentos de indol como grupos ricos en electrones que favorezcan el apilamiento π - π y con ello la formación de ensamblajes supramoleculares que lleven a semiconductores orgánicos eficientes. Este tipo de estructuras poseen extendidos sistemas π -conjugados que usualmente proporcionan una gran cantidad de electrones móviles, que son buenos moduladores de las propiedades electrónicas del dispositivo final.³ En la Figura 1 se muestran ejemplos de semiconductores orgánicos basados en BODIPYS, así como en derivados de indoles.

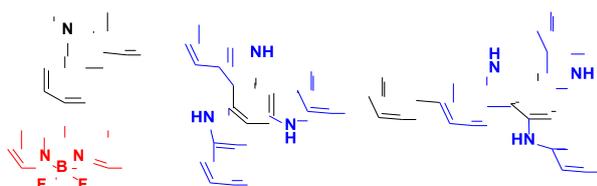
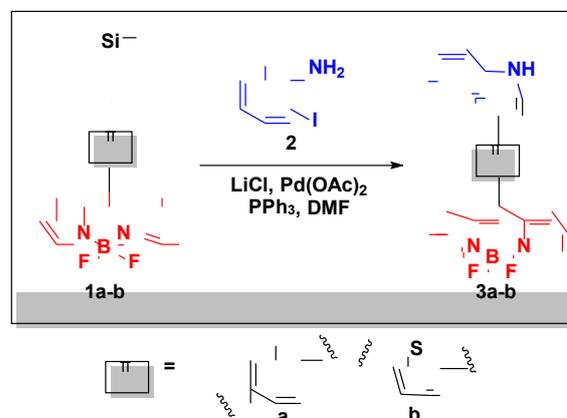


Figura 1. Ejemplo de moléculas semiconductoras basadas en BODIPYS (izquierda) y derivados de indol (derecha).

Resultados y discusión

El tratamiento de los BODIPYS **1a-b** con *o*-yodoanilina (**2**), a reflujo de DMF y con catálisis de Pd(II) rindió los compuestos objetivo **3a-b**, que fueron aislados y caracterizados mediante una combinación de técnicas espectroscópicas que incluyó RMN de ¹H, ¹³C, ¹⁹F, ¹¹B, así como espectrometría de masas de alta resolución y difracción de Rayos-X de monocristal. Además en este trabajo se presentan algunas de sus propiedades foto-físicas como su absorción UV-Vis y fluorescencia.



Esquema 1. Ruta sintética para la obtención de los compuestos objetivos **3a** y **3b**.

Conclusiones

Se aplicó la síntesis de indoles de Larock en la obtención de BODIPYS con fragmentos de indol como grupos ricos en electrones y fuerte carácter electrodonador, con el objetivo de que las estructuras supramoleculares resultantes permitan la obtención de materiales semiconductores eficientes.

Referencias

- Loudet A.; Burgess K., *Chem. Rev.* **2007**, *107*, 4891-4932.
- Corona-Sánchez R.; Arcos-Ramos R.; Amelines-Sarria O.; Jerezano-Domínguez A.; García-Ortega H.; Rivera M.; Carreón-Castro M. del P.; Farfán N., *Monatsh Chem.* **2016**, *147*, 1915-1923.
- Ruiz C.; Navarrete J. T.; Delgado M. C. Gómez-Lor B., *Org. Lett.* **2015**, *17*, 2258-2261
- Larock R.; Yum, E. J. *Am. Chem. Soc.* **1991**, *113*, 6689-6690.

SÍNTESIS DE DERIVADOS DE BORO-DIPIRROMETENO (BODIPY) FUNCIONALIZADOS CON GRUPOS AMINO COMO POSIBLES SEMICONDUCTORES ORGÁNICOS

Rossi Mazariegos-Ahuactzin,^a Luis A. Martínez-Gómez,^a Pablo Labra-Vázquez,^a Rosa Santillan^b y Norberto Farfán^{a*}

^aFacultad de Química, Departamento de Química Orgánica, Universidad Nacional Autónoma de México, 04510 México D.F., ^bDepartamento de Química, Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del IPN, Apdo. Postal 14-740, 07000, México. México. norberto.farfán@gmail.com

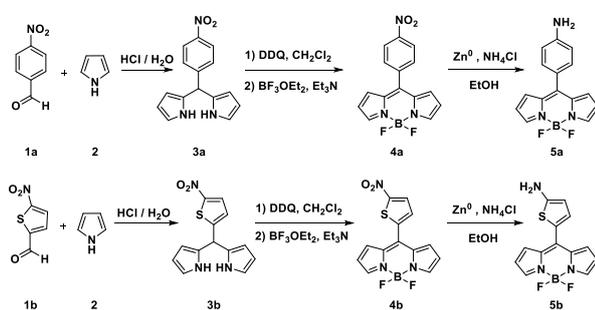
Introducción

Los derivados de boro-dipirrometeno (BODIPYs) constituyen un importante grupo de colorantes orgánicos debido a sus interesantes propiedades foto-físicas y su versatilidad química,¹ que les proveen de muy diversas aplicaciones, entre las que figuran sus usos en la fabricación de películas emisoras de luz y de materiales electroluminiscentes.¹⁻²

Además, los colorantes basados en BODIPYs se han usado como semiconductores orgánicos para energía fotovoltaica orgánica (OPV), células solares sensibilizadas por colorantes (DSSC) y diodos orgánicos de emisión de luz (OLED).³ Presentan bandas de absorción y emisión en la zona visible del espectro,⁴ tienen altos coeficientes de absorción molar, altos rendimientos cuánticos de fluorescencia,⁵ así como buena estabilidad química y fotoquímica en disolución y en estado sólido.⁶

Resultados y discusión

El tratamiento de los aldehídos aromáticos **1a-b** con pirrol (**2**) en condiciones ácidas dio lugar a los dipirrometanos correspondientes (**3a-b**), cuya posterior oxidación y coordinación con BF₃OEt₂ dio lugar a los BODIPYs **4a-b** que fueron reducidos para rendir los compuestos objetivo (**5a-b**) (Esquema 1).



Esquema 1. Ruta sintética empleada para la obtención de los BODIPYs **5a-b**.

Fue posible obtener cristales adecuados para estudios de difracción de Rayos-X de monocristal para los compuestos **3a** y **4b**, el primero mostrando un empaquetamiento no centrosimétrico con dos moléculas por unidad asimétrica. El empaquetamiento de estos compuestos, muestra un extenso apilamiento π - π lo cual sugiere una elevada deslocalización electrónica dentro de

estos sistemas cristalinos y por ende un posible uso en la fabricación de semiconductores orgánicos.

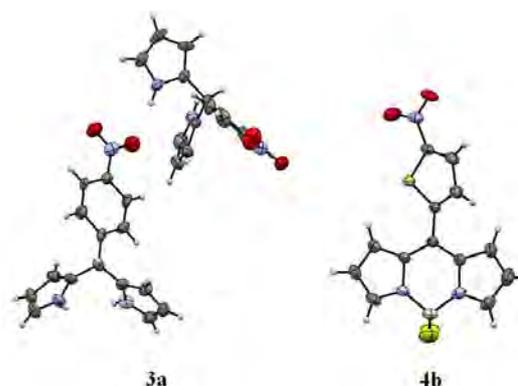


Figura 1. Diagramas ORTEP para los compuestos **3a** y **4b** con los elipsoides térmicos al 50 % de probabilidad para todos los átomos distintos de hidrógeno.

Conclusiones

Se realizó la síntesis y caracterización por técnicas espectroscópicas y espectralométricas de los compuestos **3a-b**, **4a-b** y **5a-b**, el análisis de las propiedades foto-físicas y del apilamiento π - π en algunas de sus estructuras cristalinas apuntan hacia posibles aplicaciones como semiconductores orgánicos.

Referencias

- Singh S. P.; Gayathri T., *Eur. J. Org. Chem.* **2014**, 4689-4707.
- R. Ziessel, G. Ulrich, A. Harriman, *New J. Chem.* **2007**, *31*, 496-501.
- Corona-Sánchez R.; Arcos-Ramos R.; Maldonado-Domínguez M.; Amelines-Sarria O.; Jerezano-Domínguez A.; García-Ortega H.; Rivera M.; Carreón-Castro M. P.; Farfán N., *Monatsh. Chem.* **2016**, *147*, 1916.
- Kamkaew A.; Lim S. H.; Lee H. B.; Kiew L. V.; Chung L. Y.; Burgess K., *Chem. Soc. Rev.* **2013**, *42*, 77-88.
- Shah M.; Thangaraj K.; Soong M-L.; Wolford L. T.; Boyer J. H.; Politzer I.R.; Pavlopoulos T. G.; *Heteroatom. Chem.* **1990**, *1*, 389-399.
- G. Ulrich, R. Ziessel, A. Harriman, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2008**, *47*, 1184-1201.

SÍNTESIS DE CATALIZADORES DITÓPICOS (FENOL-GUANIDINA) PARA LA RUPTURA DE ÉSTERES DE FOSFATO

Andya Jhosephin Ramírez-Irigoyen^a, Karen Lillian Ochoa-Lara^a y David Octavio Corona-Martínez^{*b}.

^aDepartamento de investigación en Polímeros y Materiales, Universidad de Sonora, Hermosillo, México;

^bDepartamento de Ciencias de la Salud. Cd. Obregón, México. dvdccch@gmail.com

Introducción

Los ésteres de fosfato son compuestos de gran importancia biológica ya que forman parte del proceso de reproducción celular y de las principales rutas metabólicas, donde la hidrólisis de estos compuestos es clave. Este es el caso de la ruptura del ATP para la obtención de energía al igual que la hidrólisis del enlace P-O de los ácidos nucleicos para dar paso a la replicación del DNA.¹ En algunos grupos de investigación se ha utilizado el motivo guanidinio en la ruptura de ésteres y en organocatálisis, debido a su posibilidad de formar enlaces de hidrógeno con carboxilatos y fosfatos, lo que da lugar a quelatos. Además, de estudios anteriores se ha propuesto la necesidad de un nucleófilo que pueda ayudar en la ruptura. Por lo anterior, sería interesante formar compuestos que tengan este motivo en su estructura y además un nucleófilo, de tal manera que pueda realizar la ruptura de ésteres de fosfato con una mayor eficiencia debido a un aumento de la molaridad efectiva (relaciona la efectividad de una especie catalítica cuando se coloca en un soporte molecular).² Como nucleófilo pueden utilizarse derivados de fenolato debido a su capacidad de poder formarse en valores de pH cercanos a valores de pH de 7, además de poder modular su desprotonación mediante la incorporación de grupos electrodonadores o electroattractores en el anillo.

Para el compuesto 1a se obtuvo un valor de punto de fusión de 220.9-224.6°C con masa molar de 214.65 g/mol. Para el compuesto 2a, se registró un punto de fusión de 209.5-213.7 °C y una masa molar de 216.67 g/mol. Se obtuvieron los espectros de RMN de ¹H y ¹³C. En el espectro de hidrógeno que se obtuvo del compuesto 1a se observó la señal correspondiente a la formación de la imina en 8.44 ppm y en 10.18 ppm la señal del grupo guanidinio.

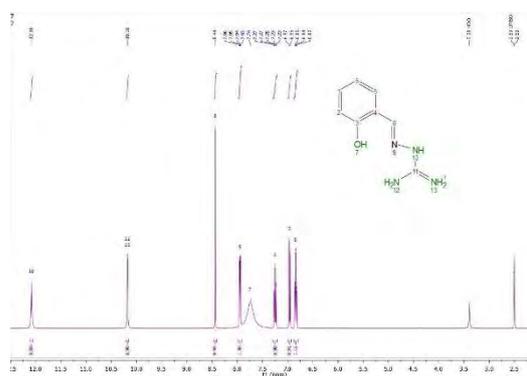
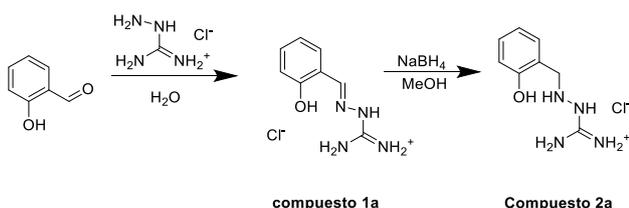


Figura 1. Espectro de ¹H RMN del compuesto 1a.

Se hicieron pruebas preliminares de estudios cinéticos y potenciométricos del compuesto 1a. En los estudios cinéticos se probó el catalizador en la ruptura del DPPNPP, donde se pudo ver que si hidroliza al sustrato. Como resultado de la titulación potenciométrica que se hizo se detectaron 3 sitios protonables (el oxígeno del fenol, el nitrógeno de la imina y un nitrógeno de la guanidina).

Resultados y discusión

En el presente trabajo se han sintetizado y caracterizado 2 catalizadores (compuesto 1a y 2a).



Esquema 1. Esquema de síntesis de la imina y su reducción.

Conclusiones

Se sintetizaron y caracterizaron dos compuestos candidatos a catalizadores derivados de guanidina y fenol. El primer compuesto presenta un grupo imina que permite que la molécula mantenga la planaridad, mientras que el producto de reducción no. Esto puede ser importante en la evaluación como catalizador en la ruptura de ésteres de fosfato.

Referencias

1. Yatsimirsky A. K. *Coord. Chem. Rev.* **2005**. 249. 1997-2011.
2. Salvio R., Volpi S., Cacciapaglia R., Sansone F., Mandolini L., Casnati A. *J. Org. Chem.* **2016**. 81. 9012.

EFECTO DEL DISOLVENTE EN LA RUPTURA SUPRAMOLECULAR DE UN TRIÉSTER DE FOSFATO

Horacio Coronado Valenzuela^a, David Octavio Corona Martínez^{*b} y Karen Lillian Ochoa Lara^a

^aDepartamento de Investigación en Polímeros y Materiales, Universidad de Sonora, Hermosillo, México; ^bDepartamento de Ciencias de la Salud, Universidad de Sonora, Cd. Obregón, México. dvdch@gmail.com

Introducción

Muchos trabajos de investigación han informado la importancia de diversos ésteres de fosfato, tal como los monoésteres y diésteres, los cuales tienen actividad biológica en diversos procesos de los organismos vivos. En esta misma clasificación de ésteres de fosfato, se encuentran los triésteres de fosfato, los cuales son compuestos de alta toxicidad para los organismos vivos¹ (figura 1).

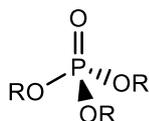


Figura 1. Estructura general de un triéster de fosfato.

La ruptura de los ésteres de fosfato es susceptible a la catálisis ácido-base general. Buscar reproducir en el laboratorio este tipo de catálisis nos lleva al uso de un amortiguador de pH². Se ha informado de la síntesis y la actividad catalítica de compuestos con unidades de guanidina. Una investigación cinética mostró que un requisito previo es la presencia simultánea de una unidad guanidinio que actúa como activador electrofílico-electrostático y una unidad de guanidina neutra que actúa como base general³.

Resultados y discusión

Se realizaron estudios cinéticos para el cálculo de la constante básica general para el rompimiento del DpPNPP en mezclas de DMSO-H₂O del 10 al 80% y MeCN-H₂O del 10 al 60% a 37 °C con el amortiguador guanidinio-guanidina. En la figura 2 (parte izquierda) se muestra la relación del logaritmo de la constante básica general ($\log k_B$) y el parámetro de Kirkwood en mezclas de DMSO-H₂O. Se puede observar que en las mezclas de mayor permitividad el complejo activado estaría menos solvatado, mientras que en las de mayor permitividad, el disolvente podría ser sustituido por otra especie que interaccionará con el complejo activado⁴. En las mezclas de MeCN sucede lo contrario (figura 2, parte derecha).

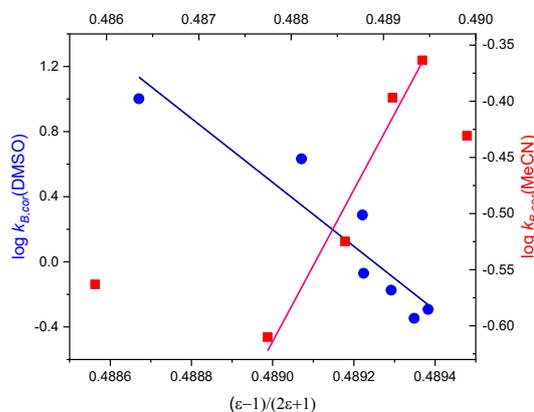


Figura 2. Correlación de Kirkwood para la ruptura del DpPNPP con guanidina en mezclas DMSO-H₂O (izquierda) y con MeCN-H₂O (derecha).

Este tipo de comportamiento en el gráfico de Kirkwood podría involucrar mecanismos diferentes en ambos medios e incluso la participación del agua como nucleófilo y una posible asociación con el catalizador protonado, en el estado de transición.

Conclusiones

De los resultados en el presente trabajo se concluye que, en el sistema utilizado en la ruptura del triéster de fosfato con guanidina, la forma neutra participa activamente en el mecanismo. Además, se obtiene evidencia de la participación del agua en el mecanismo de ruptura. Se requieren estudios de efectos cinéticos isotópicos para tener mayor evidencia. Así mismo, se recomienda evaluar con un modelo del estado de transición la posible asociación con el catalizador.

Referencias

1. Rebello-dos Santos V.M., Donnici C.L., Neves-DaCosta J.B., Rogrigues-Caixaero J.M. *Química Nova*. 30 (1): 159-170. **2007**.
2. Corona-Martínez D. O. Tesis de Maestría. UNAM. Cd. de México. **2008**.
3. Corona-Martínez D. O., Taran O., Yatsimirsky A. K. *Organic & Biomolecular Chemistry*. 873-880. **2010**.
4. Reichardt C. *Solvents and Solvent Effects in Organic Chemistry*. 3rd ed. WILEY-VCH. Weinheim, Germany. **2003**.

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE NUEVOS CRISTALES MOLECULARES DERIVADOS DE BENZOQUINONAS

Martha V. Sosa Rivadeneyra^a, María Obdulia Sánchez Guadarrama^a, María Guadalupe Vásquez Ríos^b,
María Eugenia Mendoza Álvarez^c y Herbert Höpfl^b

^aFacultad de Ciencias Químicas, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Puebla, Puebla, México; ^bCentro de Investigaciones Químicas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Cuernavaca, Morelos, México. ^cInstituto de Física, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Puebla, Puebla, México.
martha.sosa@correo.buap.mx

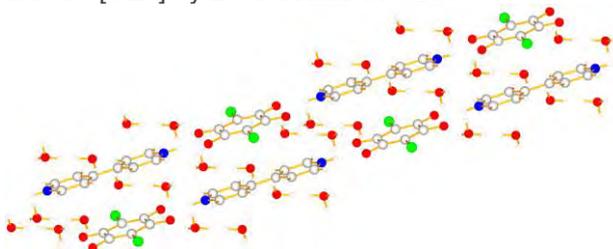
Introducción

Los materiales orgánicos cristalinos están constituidos por uno o varios compuestos químicos, los cuales dan lugar a cristales moleculares de múltiples componentes. Para ello se puede proponer un diseño racional de sólidos moleculares funcionales en la ingeniería de cristales,¹ que puede permitir la obtención de compuestos farmacéuticos² hasta materiales de aplicaciones tecnológicas tales como (semi) conductividad, ferroelectricidad y magnetismo.³

En este estudio se planteó preparar cristales moleculares multicomponentes derivados de benzoquinonas como el ácido cloranílico (CLA) y el reactivo de Lawsone (BHN) con bases dinitrogenadas tales como el 1,4-diazabicyclo [2.2.2]-octano (DABCO) y 4,4'-dipiridil (BPY), así como su caracterización por análisis elemental, análisis de difracción de rayos X de polvos y monocristal, espectroscopia de infrarrojo y mediciones de TGA / DSC.

Resultados y discusión

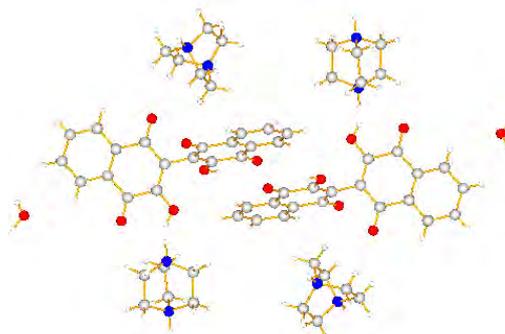
Se obtuvo el cristal molecular **1** derivado del CLA y el BPY, el cual cristalizó en un sistema triclinico con grupo espacial P-1, conteniendo en su unidad asimétrica una molécula del dicatión [BPY-2H]²⁺, un dianión [CLA]²⁻ y 2 moléculas de H₂O.



Estructura cristalina para el compuesto **1**.

Por otro lado, se obtuvo el compuesto **2** derivado del reactivo de Lawsone y el DABCO. El análisis cristalográfico del monocristal reveló que **2** cristalizó en un sistema ortorrómbico con grupo espacial Pcca, conteniendo en su unidad asimétrica dos moléculas

del dicatión [DABCO-2H]²⁺, dos del dianión [BHN]²⁻ y una molécula de H₂O.



Estructura cristalina para el compuesto **2**.

En ambas estructuras, las moléculas componentes se encuentran combinadas mediante enlaces de hidrógeno, interacciones bifurcadas [N⁺-H...O⁻ y N⁺-H...O] entre los cationes del nitrógeno y los aniones de los oxígenos de las benzoquinonas. Esto también se corroboró por espectroscopía IR, en donde se pueden observar bandas alrededor de 2300-3000 cm⁻¹ que indican un sistema intermolecular de enlaces puente de hidrógeno N⁺-H...O⁻ y N⁺-H...O. Además de las bandas situadas entre 1439-1472 cm⁻¹ (simétrica) y 1620-1635 cm⁻¹ (asimétrica) que indican la presencia del grupo carboxilato.

Conclusiones

Se obtuvieron 2 estructuras cristalinas que han sido caracterizadas por DRX de monocristal y DRX de polvos, IR y DSC/TGA. Las interacciones intermoleculares que prevalecen en su estructura, principalmente enlaces de hidrógeno, los hacen buenos candidatos para pruebas ferroeléctricas.

Referencias

- Desiraju, G. R. *J. Chem. Sci.*, **2010**, *122*, 667-675.
- Sánchez-Guadarrama, O.; Mendoza-Navarro, F.; Cedillo-Cruz, A.; Jung-Cook, H.; Arenas-García, J. I.; Delgado-Díaz, A.; Herrera-Ruiz, D.; Morales-Rojas, H.; Höpfl, H. *Cryst. Growth Des.* **2016**, *16*, 307.
- Li, J.; Liu, Y.; Zhang, Y. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2013**, *15*, 20786.

SÍNTESIS, CARACTERIZACIÓN Y EVALUACIÓN ANTIOXIDANTE DE COMPLEJOS LANTÁNIDOS DERIVADOS DE MACROCICLOS

Alex J. Salazar-Medina^a, Teresita Moreno Pérez^b, Yedith Soberanes^c y Rosa E. Navarro^a

^aDepartamento de Investigación en Polímeros y Materiales, Universidad de Sonora, Hermosillo, Sonora, México;

^bDepartamento de Ciencias Químico Biológicas, Universidad de Sonora, Hermosillo, Sonora, México;

^cCentro de Investigación en Alimentación y Desarrollo (CIAD), Hermosillo, Sonora, México.

alex.salazar@unison.mx

Introducción

La síntesis de agentes de contraste (AC) empleados en Resonancia Magnética de Imagen, ha sido objeto de numerosos estudios debido a su relevancia médica. La finalidad es obtener AC que generen imágenes cuya interpretación sea facilitada al médico, optimizando el proceso del diagnóstico tanto en tiempo como precisión.¹

El Departamento de Investigación en Polímeros y Materiales (DIPM) de la Universidad de Sonora, cuenta con amplia experiencia en la síntesis de receptores y complejos metálicos/lantánidos. Ejemplo de lo anterior es el complejo de Gd³⁺ formado a partir ciclofano 2,12-dioxa-4,7,10-tris(carboximetil)-1,4,7,10,13-pentaaza-15,30(1,4-fenilenbismetilen oxi)[13.10]orto-ciclofano, (*cyp*)H₃ (Figura 1).²

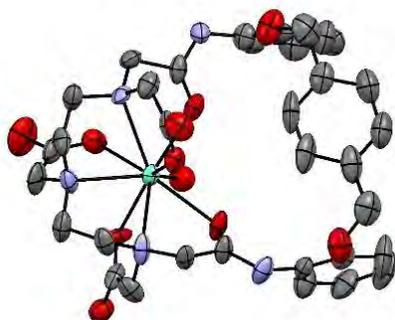


Figura 1. Estructura cristalográfica del complejo Gd(*cyp*)

Gd(*cyp*) ha mostrado buenas propiedades como AC, por lo que en este trabajo se presenta la síntesis y caracterizaron de análogos a partir del receptor (*cyp*)H₃ y los lantánidos Eu³⁺, Yb³⁺, Tm³⁺ y Dy³⁺, mediante técnicas espectroscópicas (ESI-MS, UV-Vis, IR), además de técnicas de inhibición de radicales libres mediante ensayos *in vitro*, para evaluar a la par, su capacidad como posibles agentes antioxidantes.

Resultados y discusión

La formación de los complejos lantánidos, se corroboró mediante estudios de espectrometría de masas, obteniendo los picos de relación m/z, correspondientes a los pesos moleculares de cada uno de los nuevos complejos sintetizados.

La estequiometría de los nuevos complejos lantánidos formados, se determinó mediante titulaciones en UV-Vis.

Mediante IR se observó que los principales grupos funcionales del receptor que participan en la coordinación con los iones lantánidos, corresponden a los grupos carboxílicos pendientes, nitrógeno amina y carbonilos amida de la fracción DTPA.

La capacidad de los complejos lantánidos para estabilizar radicales libres, se evaluó mediante ensayos *in vitro*, utilizando los radicales libres ABTS y DPPH. Los resultados para cada lantánido son reportados con su valor IC₅₀, es decir, la concentración requerida para inhibir el 50% de radical presente en solución. Tanto el receptor libre como los complejos sintetizados fueron efectivos inhibiendo ambos radicales.

Conclusiones

Se sintetizaron cinco nuevos complejos lantánidos derivados del receptor (*cyp*)H₃ y se caracterizaron mediante IR, Masas, UV-Vis.

Se evaluó su capacidad para inhibir radicales libres, se determinó que todos presentaron actividad antioxidante, destacando el receptor en su forma libre.

Referencias

1. Heffern, M. C.; Lanthanide Probes for Bioresponsive Imaging. *Chemical Reviews*, v. 114, n. 8, p. 4496-4539, 2014.
2. Soberanes, Y. Síntesis de Macrociclos Tipo ciclofanos y sus Complejos con Cationes de Gd³⁺ y Eu³⁺. 2015. (Dortorado). DIPM, Universidad de Sonora.

ARREGLOS SUPRAMOLECULARES FORMADOS POR ÁCIDOS BORÓNICOS Y FOSFATOS: PROPIEDADES LUMINISCENTES Y ANÁLISIS DE LA SUPERFICIE HIRSHFELD

Alicia Jaquelin Cárdenas Valenzuela^a, Glenda Yahely Ruelas Álvarez^a, Herbert Höpfl^b, J. Jesús Campos Gaxiola^a y Adriana Cruz Enríquez^a.

^aFacultad de Ingeniería Mochis, Universidad Autónoma de Sinaloa, Los Mochis, México; ^bCentro de Investigaciones Químicas de la Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Cuernavaca, México.

cruzadriana@uas.edu.mx

Introducción

Los ácidos arilborónicos se han utilizado como bloques de construcción en la química supramolecular, en el ensamblado de redes cristalinas en varias dimensiones a través de enlaces de hidrógeno.¹ Por otro lado los materiales construidos a partir de ácidos organofosfónicos han llamado la atención en el campo de la ingeniería de cristales, no sólo por sus variedad estructural, sino también debido a sus aplicaciones potenciales en el campo de la fotoquímica, biomedicina y farmacéutica.²⁻³

Recientemente en nuestro grupo de investigación se reportó la síntesis de sales orgánicas formadas a partir de ácidos piridinborónicos en combinación con ácidos carboxílicos, las cuales presentan propiedades luminiscentes interesantes debido a la agregación de sus redes supramoleculares.¹ En este sentido, con el propósito de obtener nuevos materiales orgánicos luminiscentes hemos empleado los ácidos 3-quinolinborónico (**3QBA**) y 5-isoquinolinborónico (**5IQBA**) en combinación con difenilfosfato (**DPP**) y 1-naftilfosfato (**1NP**) (Figura 1a), para obtener las sales: **3HQBA-DPP (1)**, **3HQBA-1NP (2)** y **5HIQBA-1NP (3)**, en donde los cationes y los aniones forman redes 3D, contribuyendo de esta manera en sus propiedades luminiscentes.

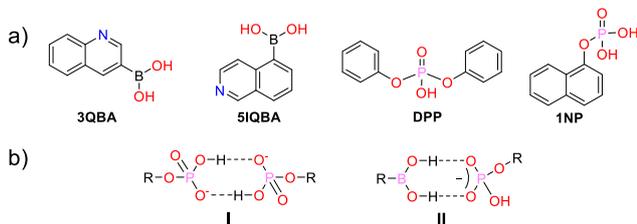


Figura 1. a) Tectones utilizados para la síntesis de las sales **1-3**. b) Sintones tipo anillo $R_2^2(8)$.

Se mostrarán los resultados de la caracterización por espectroscopia de IR, difracción de rayos X de monocristal (DRX), análisis de la superficie Hirshfeld (HS), así como, las propiedades luminiscentes en estado sólido y la evaluación del color con el diagrama de cromaticidad CIE.

Resultados y discusión

En el empaquetamiento cristalino de **1-3** se observa que los cationes quinolinio ($C_9H_7N^+H$) y los aniones difenilfosfato ($Ph_2PO_4^-$) y naftilhidrogenofosfato ($NaphHPO_4^-$) forman arreglos 2D y 3D mediante los enlaces de hidrógeno $O-H\cdots O$ (Sintones I y II, Figura 1b), $N^+H\cdots O$, $C-H\cdots O$ y las interacciones del tipo $\pi\cdots\pi$ y $B-\pi$ ($<4\text{\AA}$).

Mediante el análisis de la superficie Hirshfeld, se encontró que en los tres compuestos, la contribución de las interacciones corresponden a las del tipo, $O\cdots H/H\cdots O$ 22.8% en **1**, 31.5% en **2** y 28.9% en **3**, debido a la formación de los sintones I y II. Los porcentajes encontrados para los contactos $B\cdots C/C\cdots B$ son de 0.8%, 1.2% y 1.7% en **1, 2** y **3** respectivamente, atribuidas a las interacciones $\pi\cdots\pi$ y $B-\pi$, estos resultados concuerdan con lo observado en el análisis por difracción de rayos-X.

En los espectros de emisión se observa que **2** tiene un desplazamiento hacia el rojo en comparación con **1** y **3**, debido a los diferentes empaquetamientos cristalinos encontrados en dichos compuestos, influenciados principalmente por las interacciones $O-H\cdots O$, $\pi\cdots\pi$ y $B-\pi$.

Conclusiones

Las redes supramoleculares 2D y 3D presentes en las sales obtenidas se forman a través de los sintones I y II, así como por las interacciones $\pi\cdots\pi$ y $B-\pi$. La sal **2** presenta mejores propiedades luminiscentes debido a su empaquetamiento molecular más rígido, contribuyendo a su desplazamiento batocrómico y mayor tiempo de vida media.

Referencias

- Campos-Gaxiola J. J., García-Grajeda B. A., Hernández-Ahuactzi I. F., Guerrero-Álvarez J. A., Höpfl, H., Cruz-Enríquez A. *CrystEngComm*, **2017**, 19 (27), 3760–3775.
- Lie S., Maris T., D. Wuest J., *Cryst. Growth Des.*, **2014**, 14, 3658–3666.
- Van Megen M., Frank W., Reiss G. J., *CrystEngComm*, **2016**, 18, 3574-3584.

LIGANTE TRICARBOXÍLICO Y SU USO POTENCIAL PARA LA SINTESIS DE MATERIALES 3D, FORMACION DE MOFs CON TIERRAS RARAS

Gelen Gómez^a, Hiram Isaac Beltrán^b

^aPosgrado en Ciencias Naturales e Ingeniería, Universidad Autónoma Metropolitana-Cuajimalpa, CDMX, México;

^bDepartamento de Ciencias Básicas, Universidad Autónoma Metropolitana-Azcapotzalco, CDMX, México.

gelen2602@gmail.com

Introducción

Los Metal-Organic Frameworks (MOF) son una clase de materiales cristalinos formados por la unión de átomos metálicos coordinados a ligantes orgánicos propiciando estructuras en 1D, 2D o 3D. Estos materiales han generado gran interés en los últimos años debido a sus múltiples aplicaciones en diversas áreas, incluyendo: adsorción de gases, sensores colorimétricos, liberación controlada de fármacos, catálisis, antenas ópticas, etc. El estudio de estas estructuras y las combinaciones casi ilimitadas entre metales (coordinación) y los ligantes (geometría) son nuestro principal interés, ya que de esta manera las áreas superficiales de los nuevos MOF sintetizados estarán determinadas solo por las características de sus unidades básicas de construcción.¹

Resultados y discusión

De acuerdo con el siguiente esquema de reacción (Figura 1) en este trabajo se presenta la síntesis de un ligante con simetría C₃ para ser empleado como parte del diseño y generación de los materiales MOF:

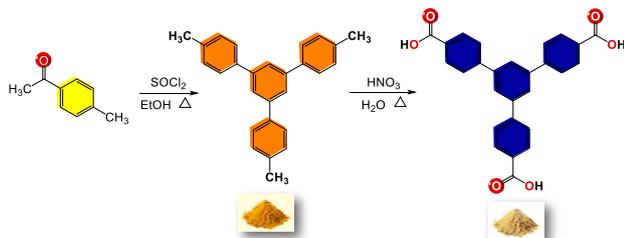


Figura 1. Síntesis del ligante tricarboxílico

Este ligante se está haciendo reaccionar con nitratos de metales del período 6, que incluyen Pr, Eu, Tb, Er y Tm (Figura 2) para formar el material correspondiente. Se están probando diversas condiciones de reacción para la síntesis de las redes metalorgánicas dentro de las cuales destacan: metátesis² y solvotermal. Además, se han puesto a cristalizar directamente en la estufa, variando la temperatura para lograr obtener monocristales adecuados para la difracción de rayos X.

Por otro lado, los estudios de DRX de polvos nos dan evidencia del avance significativo en la obtención de los materiales, debido a que los cristales obtenidos de los MOFs muestran picos claramente definidos

diferentes a los mostrados en las materias primas y como prueba adicional se obtuvieron micrográficas mediante SEM que demuestran la formación de material cristalino (Figura 3).



Figura 2. Síntesis de los materiales MOF de TR.

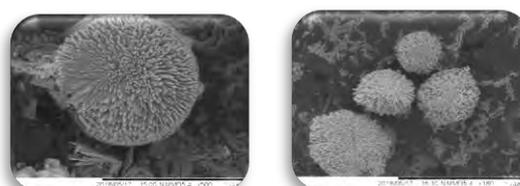


Figura 3. Micrográficas por SEM: (MA-Eu, izquierda) (MA-Tm, derecha)

Como primera parte del trabajo se han sintetizado estos ligantes (ver figura 1) con un rendimiento superior al 90%, los cuales se caracterizaron mediante técnicas de análisis como: resonancia magnética nuclear ¹H y ¹³C, infrarrojo-FT, espectrometría de masas y análisis termogravimétricos.

Conclusiones

Se sintetizaron los ligantes con altos rendimientos y se obtuvo evidencia de la formación de material cristalino a través de microscopía SEM.

Referencias

- Kitagawa S., Kitaura R., Noro S., Functional porous coordination polymers, *Angew. Chem. Int.*, 2004, 43, 2334–2375
- Beltran H. I., Serna S. L., Nuñez M. L., Flores J., Simeón R. L., An alkaline one-pot metathesis reaction to give a [Cu₃(BTC)₂] MOF at r.t., with free Cu coordination sites and enhanced hydrogen uptake properties, *RSC Adv.*, 2013, 3, 10962–10972.

INTERACCIÓN DE HISTIDINA E HISTAMINA CON EL COMPLEJO [Yb(cy1a)]

Octavio Serna Medina^a, Rosa Elena Navarro^a, Yedith Soberanes^b, Enrique F. Velázquez, Hisila Santacruz^a.

^aUniversidad de Sonora, Departamento de Investigación en Polímeros y Materiales, Universidad de Sonora. Apartado postal 130, Hermosillo, Sonora 83000 México.

^bCentro de Inv. En Alimentación y Desarrollo, A.C. (CIAD), Hermosillo, Son, México
e-mail: octavio.sernamed@correo.uson.mx

Resumen

La importancia de las interacciones de histidina con iones metálicos es de gran importancia debido a su función biológica como el componente principal de los centros activos de muchas metaloproteínas, además, la histamina es un compuesto que actúa en el organismo como hormona y como neurotransmisor¹.

En el grupo de trabajo se sintetizó el complejo [Yb(cy1a)] a partir del isómero cíclico (cy1a)H₃, obtenido de dietilentriaminapentaacético (DTPA) y la amina p-xilendiamina. Este complejo es soluble en agua y es muy estable a diferentes valores de pH, principalmente a pH fisiológico².

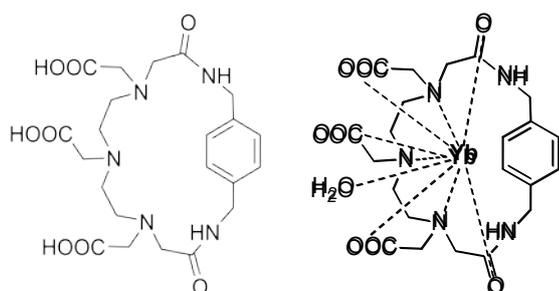


Figura 1. Estructura del ciclofano (cy1a)H₃ (izquierda) y su complejo con iterbio [Yb(cy1a)] (derecha).

En el presente trabajo se evaluó la capacidad de formar aductos entre el complejo [Yb(cy1a)] y la histidina e histamina mediante titulaciones por NMR ¹H a pH 7.2, manteniendo constante la concentración del complejo y variando la concentración de histidina o histamina.

Referencias

- Inoue, M. B., Navarro, R. E., Inoue, M., & Fernando, Q. (1999). *Inorganica Chimica Acta*, 295(1), 115-119.
- R E Navarro, Y. Soberanes, Sh. D-Yañez, O. Jatomea, J Z Ramirez and Mi Inoue. *Polyhedron* 92 (2015) 105-110.

Resultados

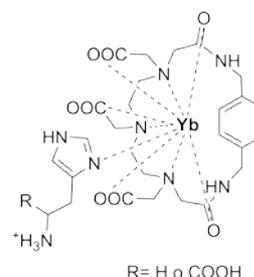


Figura 2. Posible estructura de los aductos [Yb(cy1a)] histidina o histamina.

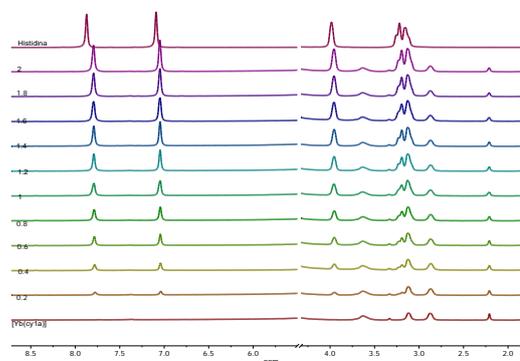


Figura 3. Espectros de RMN de ¹H obtenidos de la titulación el complejo [Yb(cy1a)] con histidina a pH 7.2. Relación molar de 0-2.

Conclusiones

En los espectros de RMN se observa un desplazamiento de las señales de los protones aromáticos del huésped, lo que indica que el anillo de imidazol interacciona con el complejo [Yb(cy1a)]. Esto se observa tanto para la histidina como para la histamina, por lo que se puede decir que ocurre una segunda complejación formando los aductos. Se calcularon las constantes de asociación de los aductos [Yb(cy1a)]-histidina $K = 300 \text{ M}^{-1}$ [Yb(cy1a)]-histamina $K = 400 \text{ M}^{-1}$.

EVALUACIÓN DE ACTIVIDAD ANTIOXIDANTE Y BIOMIMÉTICA DE LOS RECEPTORES TIPO CICLOFANO PO, PC, OD Y SUS COMPLEJOS CON Cu(II)

Jessica A. Hernández Camarena^a, Rocío Sugich-Miranda^a y Alex J. Salazar-Medina^b

^aDepartamento de Ciencias Químico-Biológicas, Universidad de Sonora, Hermosillo, Sonora, México;

^bDepartamento de Investigación en Polímeros y Materiales, Universidad de Sonora, Hermosillo, Sonora, México
jessicahernandezcamarena@gmail.com

Introducción

Los radicales libres son moléculas altamente reactivas con electrones desapareados capaces de interactuar rápidamente con moléculas cercanas. Bajo estrés oxidativo, el cuerpo humano incrementa la producción de radicales libres, y una exposición prolongada bajo estas condiciones, puede afectar la homeostasis celular, conduciendo al desarrollo de enfermedades crónico-degenerativas como el cáncer.¹ Por lo anterior, existe un interés científico en la síntesis y desarrollo de nuevos antioxidantes para su uso como posibles fármacos en terapia médica. Una de las estrategias para desarrollar nuevos antioxidantes consiste en imitar la estructura o mecanismo de acción de enzimas antioxidantes, como la superóxido dismutasa (SOD), presente en las primeras líneas de defensa celular contra los radicales libres.

En el Departamento de Investigación en Polímeros y Materiales de la Universidad de Sonora, se sintetizaron tres complejos metálicos de Cu²⁺ a partir de los receptores macrocíclicos PO, PC y OD (Figura 1)².

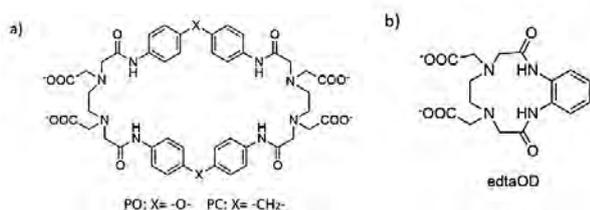


Figura 1. Estructuras químicas de ligantes macrocíclicos a) PO y PC; b) EDTAOD.

Estos complejos presentan similitudes con la SOD, en el modo de coordinación del centro metálico. Físicoquímicamente poseen gran estabilidad, por lo que en este estudio se evaluó la capacidad tanto de los complejos de Cu²⁺, como de los receptores en su forma libre, para imitar las propiedades antioxidantes de dicha enzima, mediante ensayos espectrofotométricos y biomiméticos *in vitro*.

Resultados y discusión

Se determinó la capacidad de los ligantes y sus complejos de Cu²⁺ para estabilizar radicales libres por medio de ensayos *in vitro*. Los resultados para estabilizar radicales sintéticos ABTS se presentan en la tabla 1:

Tabla 1. Actividad antioxidante frente a radicales ABTS
Concentración inhibitoria media (IC₅₀ μM)

Ligantes	IC ₅₀	Complejos	IC ₅₀
PO	10.39±1.60	Cu ₂ PO	9.97±0.75
PC	11.25±1.34	Cu ₂ PC	17.92±0.70
OD	24.76±1.30	CuOD	13.66±3.05

*Control positivo: Ácido Ascórbico IC₅₀ = 26.42 ± 2.15

Tanto los receptores PO y PC, así como sus complejos de Cu²⁺, fueron capaces de estabilizar al radical libre ABTS mediante ensayos *in vitro*, sin una diferencia estadísticamente significativa entre ellos.

La diferencia entre CuOD y OD fue más evidente, destacando el complejo metálico por su capacidad para estabilizar al radical libre. El complejo binuclear Cu₂PO inhibió el 50% de radicales libres en solución requiriendo una concentración menor, en comparación con su análogo binuclear Cu₂PC y el complejo mononuclear CuOD.

Actualmente se están llevando a cabo estudios para evaluar la actividad como mimético SOD tanto de los receptores como de sus respectivos complejos.

Conclusiones

Se determinó la capacidad de los receptores PO, PC y OD, así como sus complejos de Cu²⁺ para estabilizar radicales libres ABTS mediante ensayos *in vitro*.

Referencias

- Kunwar, A., & Priyadarsini, K. I. (2011). Free radicals, oxidative stress and importance of antioxidants in human health. *Journal of Medical & Allied Sciences*, 1(2), 53-60.
- Sugich-Miranda, R., Sotelo-Mundo, R. R., Silva-Campa, E., Hernández, J., Gonzalez-Aguilar, G. A., & Velazquez-Contreras, E. F. (2010). Antioxidant capacity of binuclear Cu(II)-cyclophanes, insights from two synthetic bioactive molecules. *Journal of biochemical and molecular toxicology*, 24(6), 379-383.

NANOTUBOS DE ÓXIDO DE TITANIO PARA MEJORAR LA PROLIFERACIÓN CELULAR SOBRE TITANIO PURO

I. P. Torres-Avila¹, E. Hernández-Sánchez¹, E. V. García-Báez¹ y P. González-García¹

¹Instituto Politécnico Nacional, UPIBI, Avenida Acueducto s/n, Barrio La Laguna Ticomán, 07340 Zacatenco México City, México, itzelpam_9318@hotmail.com

Introducción

El Titanio y sus aleaciones tienen una gran importancia en aplicaciones biomédicas por su buena biocompatibilidad, alta resistencia específica, bajo módulo de elasticidad y resistencia a la corrosión al generar una capa delgada de óxido protectora. Sin embargo, esta capa lisa protectora puede ser su principal desventaja cuando es utilizado como implante al limitar la adhesión celular. Por lo tanto, este trabajo se concentra en la modificación superficial de este metal, mediante la técnica llamada oxidación anódica. Dicha técnica nos permite la formación de micro/nano estructuras tubulares obteniendo así una capa porosa de óxido de titanio, como se observa en la Figura 1.¹

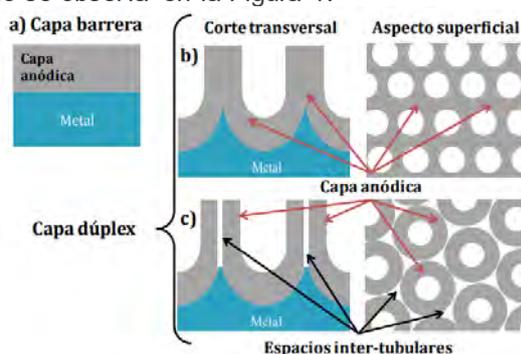


Figura 1 Representación esquemática de la formación de nanotubos por oxidación anódica.²

Resultados y discusión

Para realizar la oxidación anódica se utilizó un electrolito base etilenglicol (EG) con 0.5% peso de fluoruro de amonio (NH_4F) y 1% de agua destilada. Las condiciones de experimentación fueron a 60 V con periodos de 10, 20, 30, 40, 50 y 60 min. Se utilizó un electrodo de grafito como cátodo y la pieza de Ti funcionó como el ánodo, en el cual se lleva a cabo la oxidación.

De acuerdo a los resultados, la topografía más uniforme se obtuvo a los 10 min, de igual forma se puede apreciar en la Figura 2 no solo la superficie porosa sino también espacios inter tubulares que nos permiten clasificarlos como nanotubos, así como la distribución de los tamaños de poro a este tiempo, siendo predominante el diámetro de 60 nm.

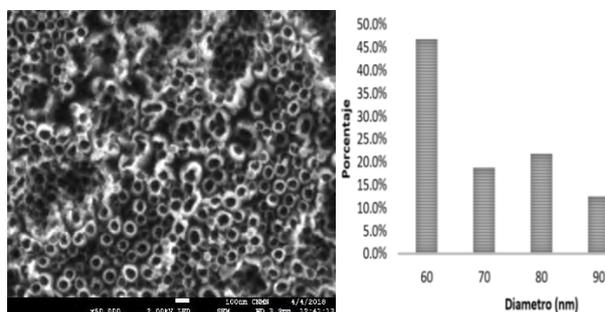


Figura 2 Pieza modificada por oxidación anódica a 10 min.

Posteriormente se realizó una prueba de mojabilidad que indica indirectamente el grado de inmovilización celular, distribución de fármacos, transferencia genética entre otras aplicaciones³, como se puede apreciar en la Figura 3 donde el ángulo de contacto disminuyó en la superficie tratada.

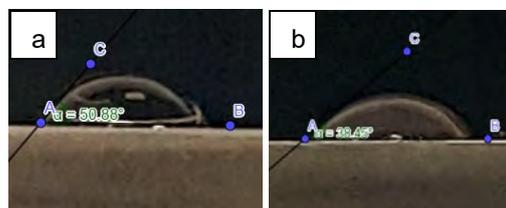


Figura 3 Mojabilidad pieza sin modificar (a) y pieza modificada a 10 min (b)

Conclusiones

Se pueden obtener nanotubos uniformes en un corto periodo de tiempo mediante oxidación anódica, para obtener superficies más hidrofílicas que nos permita la adhesión celular teniendo en cuenta para futuras referencias en ensayos in vitro.

Referencias

- Lin Z., Wang J., J Phys Chem C 113, 2009, 4026
- Buser D., Cochran D.L., Hirt H.P., Nolte L.P., Nydegger T., Oxland T., Schenk R.K., Snetivy D., J. Biomed. Mater. Res 45 (2), 1999, 75.
- Beyens C., Brés E., Elefterie F., Maschke U., Reyes-Gasga J., Tiznado-Orozco G., Materials science and engineering C 57, 2015, 133.

SÍNTESIS DE BASES DE SCHIFF TIPO SALOFEN DERIVADAS DE NÍQUEL CON POSIBLES PROPIEDADES DE ÓPTICA NO LINEAL.

Cristina Jiménez^a, Alejandro Enríquez^a, Alberto Vega^a, Norberto Farfán^a, Rosa Santillan^b y Pascal G. Lacroix.^c

^aFacultad de Química, Departamento de Química Orgánica, Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad Universitaria, Ciudad de México No. 04510, México. ^bDepartamento de Química, Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del IPN, CINVESTAV, Apdo., Postal 14-740, Ciudad de México, 07000, México. ^cLaboratoire de Chimie de Coordination du CNRS, 205 route de Narbonne, F-31077 Toulouse, France. jimenezcuriel@yahoo.com

Introducción

En general, las bases de Schiff tipo salofen cuentan con múltiples usos como lo son: la catálisis, la fragmentación del ADN, en diodos orgánicos, y en materiales ópticos. Estos pueden generar fenómenos de óptica no lineal como la generación del segundo armónico.¹ Recientemente, compuestos de diorganoestaño derivados de fluoreno² (Figura 1), han mostrado un incremento en la absorción de dos fotones. Se ha observado que la modificación de los centros metálicos de las bases de Schiff tipo salofen, puede mejorar sus propiedades ópticas.

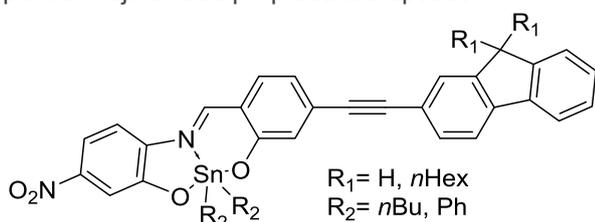


Figura 1

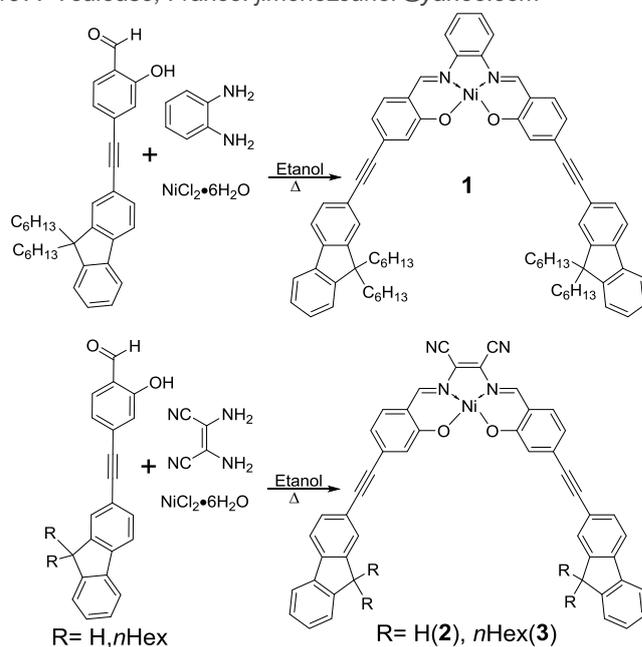
Resultados y discusión

En el presente trabajo se presenta la preparación de 3 complejos de níquel (II), tipo donador-aceptor, derivados de bases de Schiff tipo Salofen, sintetizadas a través de una reacción de multicomponentes empleando $\text{NiCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, 4-([9H-fluoren-2-il)etilnil)-2-hidroxibenzaldehído, diaminomaleonitrilo ó 1,2-diaminobenceno, como se muestra en el Esquema 1.

En RMN de ^1H se puede identificar la señal correspondiente al grupo imino y en IR la vibración asociada al $\text{C}=\text{N}$, como se muestra en la Tabla 1 para los tres diferentes complejos.

Tabla 1

	Rendimiento	RMN de ^1H ($\text{HC}=\text{N}$, ppm)	νIR ($\text{C}=\text{N}$, cm^{-1})
1	82%	8.2	1604
2	48%	8.5	1606
3	45%	8.3	-



Esquema 1

El complejo de níquel derivado del 1,2-diaminobenceno, fue un sólido de color rojo, mientras que los complejos derivados del diaminomaleonitrilo fueron sólidos color morado. Los complejos que cuentan con cadenas de *n*-hexilo en el fluoreno fueron solubles en cloroformo y el que carece de éstas fue insoluble en él. Los diferentes complejos derivados de níquel se obtuvieron con rendimientos moderados y se caracterizaron por diferentes métodos espectroscópicos.

Conclusiones

Este tipo de complejos níquel derivados bases de Schiff tipo salofen permitirá evaluar las propiedades de ONL de segundo orden.

Referencias

- Lacroix G. P., Di Bella S., Ledoux I., Farfán N., *Chem. Mater.* **1996**, 8, 541.
- Enríquez-Cabrera A., Vega-Peñalosa A., Álvarez-Venicio, V., Romero-Ávila, M., Lacroix G. P., Ramos-Ortiz G., Santillan R., Farfán N., *J. Organomet. Chem.* **2018**, 855, 51.

SÍNTESIS, CARACTERIZACIÓN Y ESTUDIOS DE ADSORCIÓN EN LA INTERFACE AIRE- AGUA DE BASES DE SCHIFF MACROCÍCLICAS

Andrea Ugalde Torres^a, Josué Juárez^b, Ramón A. Moreno Corral^c y Viviana Reyes Márquez^a

^a Departamento de Ciencias Químico Biológicas, Universidad de Sonora, Hermosillo, Sonora, México; ^b Departamento de Física, Universidad de Sonora, Hermosillo, Sonora, México; ^c Departamento de Investigación en Polímeros y Materiales, Universidad de Sonora, Hermosillo, Sonora, México. viviana.reyes@unison.mx

Introducción

La química supramolecular conocida también como la química del enlace no covalente, es una ciencia interdisciplinaria que tiene como objetivo estudiar las características químicas, fisicoquímicas y en determinados casos biológicas de las especies que se mantienen unidas y organizadas mediante interacciones no covalentes, de tal forma que grandes áreas de la ciencia como la química orgánica, fisicoquímica, química inorgánica y en algunos casos la bioquímica o inmunología contribuyen de manera significativa en los estudios relacionados con la química supramolecular.¹ El diseño y la obtención de nuevas moléculas receptoras es una de las áreas que más interesa a la química supramolecular e indudablemente donde la química orgánica juega un papel fundamental. La obtención de nuevos macrociclos es ampliamente estudiada debido a que históricamente éstos se sintetizan mediante rutas largas o complicadas dando como resultado un bajo rendimiento global.² Una de las opciones que ha llamado la atención es la generación de macrociclos tipo bases de Schiff ya que poseen la ventaja de contar con átomos electrodonadores y ser empleados en la química de coordinación y a su vez la posibilidad de reducir estos compuestos a su correspondiente amina secundaria y estudiarlos en el reconocimiento molecular de diversas moléculas de tipo orgánico.³

Resultados y discusión

Los tres macrociclos fueron sintetizados mediante una ruta de síntesis de un solo paso, haciendo reaccionar a las materias primas en una estequiometría 1:1, utilizando como disolvente etanol. A un matraz que contenía 50 mL de la disolución de la diamina empleada se adicionaron cinco alícuotas de la disolución del compuesto carbonílico. Transcurridas 6 h de reacción se observó la presencia de un precipitado en el matraz, el cual en cada uno de los casos fue separado mediante filtración, recuperando el producto sólido. En la Figura 1 se muestran las estructuras químicas de las tres moléculas receptoras sintetizadas.

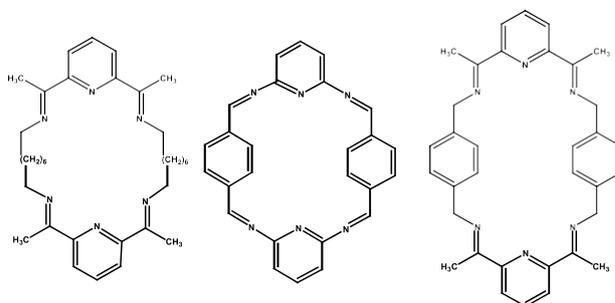


Figura 1. Estructuras químicas representativas de los ligandos sintetizados en este trabajo.

Los compuestos se caracterizaron por técnicas espectroscópicas convencionales como IR, UV/Vis, RMN ¹H y ¹³C y espectrometría de masas (ESI+). Los rendimientos de la reacción varían desde 30% al 50%. Los estudios de adsorción se realizaron en una balanza de Langmuir-Blodgett, depositando 20 µL del macrociclo disuelto en cloroformo (1 mg/mL) sobre la superficie de la fase acuosa. El área por molécula los macrocíclicos se determinaron a partir de las isotermas de adsorción presión superficial (Π) vs Área obtenidas en la balanza de Langmuir-Blodgett.

Conclusiones

Se sintetizaron y caracterizaron tres nuevos receptores macrocíclicos con buenos rendimientos de recuperación, cuya ventaja principal es el empleo de un método simple, sin uso de plantilla, ni alta dilución. Los estudios cualitativos en disolución realizados por UV/Vis muestran importantes cambios tras la complejación y sugieren que estos compuestos pueden actuar como buenos receptores para aniones y metales. Las isotermas Π vs A obtenidas para estos macrociclos demuestran que son capaces de mantenerse en la interface aire-agua, mostrando un esparcimiento superficial adecuado.

Referencias

1. Steed W., Atwood J. L., *Supramolecular Chemistry*, John Wiley and Sons, **2009**.
2. Gale P. and Steed J. *Supramolecular Chemistry: from molecules to nanomaterials*, John Wiley and Sons, Ltd **2012**.
3. Gregolinski, J.; Slepokura, K.; Páckowsky, T.; Lisowski, J. Expansion of a 2 + 2 Macrocycle into a 6 + 6 Macrocycle: Template Effect of Cadmium(II). *Org. Lett.* **2014**, *16*, 4372-4375.

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN FÍSICOQUÍMICA DE RECEPTORES ACÍCLICOS DERIVADOS DE BENCIMIDAZOL

Rey Manuel Andrés Partida Rivera^a, Josué Juárez^b Ramón A. Moreno Corral^c y Viviana Reyes Márquez^a

^a Departamento de Ciencias Químico Biológicas, Universidad de Sonora, Hermosillo, Sonora, México; ^b Departamento de Física, Universidad de Sonora, Hermosillo, Sonora, México; ^c Departamento de Investigación en Polímeros y Materiales, Universidad de Sonora, Hermosillo, Sonora, México. viviana.reyes@unison.mx

Introducción

La química supramolecular es un área sumamente interdisciplinaria cuyas líneas de estudio han sido extendidas hacia diversas áreas de la química, la física y la bioquímica;¹ particularmente la química orgánica logra un gran aporte debido al uso de los métodos sintéticos necesarios para lograr el diseño, la obtención o modificación química de moléculas que funcionen como anfitriones o receptores para una gran variedad de huéspedes.² Para la síntesis de receptores es importante considerar los grupos basados en la unidad estructural del bencimidazol e imidazol. Estos receptores poseen buenas características estructurales y están siendo ampliamente estudiados debido a la versatilidad que muestra este grupo de moléculas, dado que son útiles o efectivos en tratamientos antimicrobianos, (antibacterianos, antiparasitarios, antimicóticos), en la formación de compuestos de coordinación con metales y su uso en el área farmacéutica como productos anticancerígenos, de ahí que este tipo de compuestos hayan sido estudiados en áreas como la química de coordinación, anfitrión-huésped, autoensamble y catálisis supramolecular.³

Resultados y discusión

La obtención de las cuatro moléculas siguió una metodología que consistió en hacer reaccionar el tereftaldehído con cuatro diferentes aminas, utilizando una estequiometría 1:2, y etanol como medio de reacción. Transcurrida 1 h desde que las materias primas fueron mezcladas y disueltas se observó un precipitado color amarillo en todos los casos, el cual fue separado de la fracción líquida mediante filtración para obtener el producto sólido. En la Figura 1 se muestran las estructuras químicas de los cuatro ligantes sintetizados.

Estos compuestos han sido caracterizados por las técnicas espectroscópicas convencionales como FTIR, UV/Vis, RMN ¹H y ¹³C y espectrometría de masas. Los rendimientos con los cuales fueron recuperados van del 40-80 %. Además, se analizaron las propiedades de adsorción en la interfase aire-agua y el área por molécula de los compuestos

sintetizados mediante el análisis de las isotermas de adsorción presión superficial (Γ) vs Área obtenidas en una balanza de Langmuir-Blodgett.

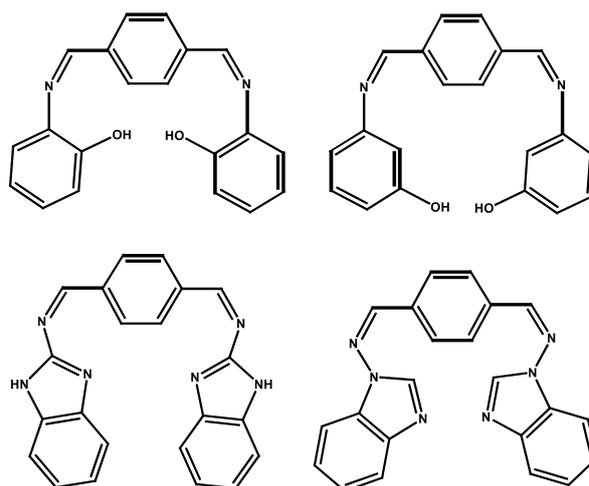


Figura 1. Estructuras químicas representativas de los ligantes sintetizados en este trabajo.

Conclusiones

Se logró la obtención y caracterización fisicoquímica de cuatro nuevos compuestos con buenos rendimientos de recuperación, cuya ventaja principal es la facilidad de la metodología empleada. Los estudios en disolución preliminares con aniones y metales muestran cambios importantes que sugieren que estos compuestos pueden actuar como buenos receptores para dichas especies. Los compuestos son capaces absorberse en la interfase aire-agua, mostrando un esparcimiento superficial adecuado, permitiendo obtener isotermas Γ vs A características para este tipo de compuestos.

Referencias

1. Steed W. and Atwood J. L., *Supramolecular Chemistry*, John Wiley and Sons, **2009**.
2. Gale P. and Steed J. *Supramolecular Chemistry: from molecules to nanomaterials*, John Wiley and Sons, Ltd 8. **2012**.
3. Zapata, F.; Caballero, A.; White, N.-G.; Claridge, T.; Costa, P.-J.; Felix, B.; Beer, P.-D. Fluorescent charge-assisted halogen-bonding macrocyclic halo-imidazolium receptors for anion recognition and sensing in aqueous media. *J. Am. Chem. Soc.* **2012**, *134*, 11533-11541

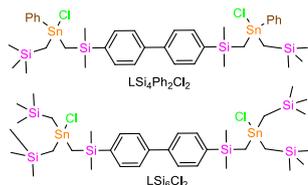
FORMACIÓN DE SISTEMAS MACROCÍCLICOS MEDIANTE EL AUTOENSAMBLE DE BLOQUES DINUCLEARES DE ORGANOESTAÑO (IV) Y DICARBOXILATOS

Rodolfo Martínez Romero^a, Jeciel Rosas Valladares^a, Irán Rojas León^{a,b}, María Guadalupe Vasquez Ríos^a, Herbert Höpfl^a y Klaus Jurkschat^b

^aCentro de Investigaciones Químicas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Cuernavaca, México; ^bLehrstuhl für Anorganische Chemie II, Fakultät für Chemische und Biologie, Technische Universität Dortmund, Alemania
E-Mail: rodolfo.martinezr@uaem.edu.mx, hhopfl@uaem.mx

Introducción

Los complejos de organoestaño (IV) derivados de ácidos carboxílicos se han estudiado extensamente en los últimos años, debido a su potencial farmacéutico como agentes antitumorales, antifúngicos y antibacteriales,¹ así como las estructuras supramoleculares versátiles que forman. Los carboxilatos de organoestaño presentan una gran variedad estructural en disolución y estado sólido, tales como monómeros, dímeros, tetrámeros, escaleras oligoméricas, etc.² En este trabajo se presenta la síntesis de 2 tectones dinucleares de organoestaño (IV), Esquema 1; los cuales posteriormente serán utilizados mediante el autoensamble con ácidos carboxílicos para la formación de estructuras macrocíclicas.



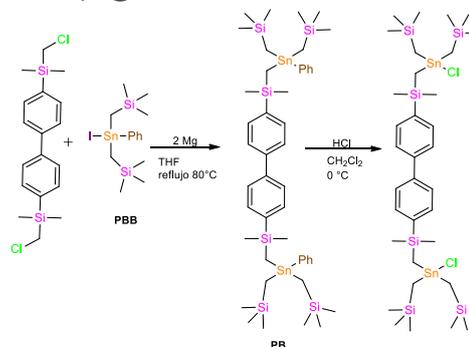
Esquema 1. Bloques dinucleares de organoestaño (IV).

Resultados y Discusión

En el esquema 2 se ilustra como ejemplo la síntesis del compuesto LSi_6Cl_2 . El bloque de organoestaño se obtuvo partiendo del 4,4'-dibromo-1,1'-bifenilo, el cual se hizo reaccionar con *n*-butil-litio y con cloro(clorometil)dimetilsilano. Una vez que se obtuvo el precursor se hizo reaccionar con PPB en una reacción Grignard para la formación del compuesto PB y finalmente se desplazó un anillo aromático por un cloro en una reacción del compuesto PB con HCl a 0 °C.

Tabla 1. Datos de RMN (δ , ^{119}Sn y ^{29}Si) para los bloques de construcción dinucleares LSi_6Cl_2 , $LSi_4Ph_2Cl_2$ y el macrociclo AcTer.

LSi_6Cl_2		$LSi_4Ph_2Cl_2$		Macrociclo AcTer	
^{29}Si (ppm)	^{119}Sn (ppm)	^{29}Si (ppm)	^{119}Sn (ppm)	^{29}Si (ppm)	^{119}Sn (ppm)
2.32	172.7	-2.4	100	-2.5	-45
2.61		2.7			



Esquema 2. Síntesis del bloque dinuclear LSi_6Cl_2 .

La reacción del tectón dinuclear $LSi_4Ph_2Cl_2$ y el ácido tereftálico en presencia de base conduce a la formación del compuesto macrocíclico 1:1 AcTer; fue posible la caracterización en estado sólido y solución, Figura 1 y Tabla 1.

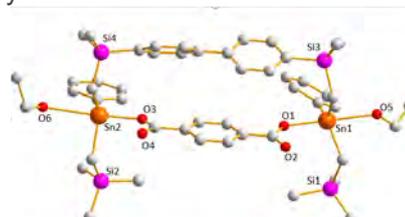


Figura 1. Estructura molecular en estado sólido del compuesto macrocíclico AcTer.

Conclusiones

Se han preparado bloques de construcción dinucleares de diorganoestaño (IV) que permitirán la construcción de nuevas estructuras supramoleculares en 0D, 1D, 2D ó 3D.

Referencias

- Gielen, M.; Biesemans, M.; Willem, R. Appl. Organomet. Chem. 2005, 19, 443-444.
- Ma, C.L.; Jiang, Q.; Zhang, R.F.; Wang, D.Q. Dalton Trans. 003, 2975-2977.

Agradecimientos

Se agradece al CONACyT por el apoyo financiero a través de una beca de licenciatura y del proyecto de Ciencia Básica 158098, y a la Red Temática de Química Supramolecular (No. 294810).

ANÁLISIS DE LAS INTERACCIONES INTERMOLECULARES Y SU INFLUENCIA EN LAS PROPIEDADES LUMINISCENTES DE LOS COMPUESTOS $[C_{18}H_{14}N_5]Cl$ Y $[C_{18}H_{15}N_5]Cl_2 \cdot H_6O_3$

María Edith Ruelas Ávila^a, José de Jesús Campos Gaxiola^a, Herbert Höpfl Bachner^b, Gerardo González García^c, Ramón Antonio Zárraga Núñez^c y Adriana Cruz Enríquez^a

^aFacultad de Ingeniería Mochis, Universidad Autónoma de Sinaloa, Los Mochis, México; ^bCentro de Investigaciones Químicas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Cuernavaca, México; ^cDivisión de Ciencias Naturales y Exactas, Universidad de Guanajuato, Guanajuato, México.

cruzadriana@uas.edu.mx

Introducción

En los últimos años se ha tenido un gran interés en la ingeniería de cristales, para la obtención de productos farmacéuticos y el desarrollo de materiales luminiscentes. La Ingeniería cristales consiste en la comprensión de las interacciones intermoleculares que gobiernan el empaquetamiento cristalino, lo que permite el diseño de nuevas formas sólidas con propiedades físicas y químicas deseables.¹ En base a lo anterior, la síntesis no covalente ha surgido como un área de investigación importante ya que permite el diseño de nuevos arreglos moleculares con propiedades fotofísicas, ejerciendo una gran influencia en la luminiscencia de nuevos materiales.² En este contexto las sales con aniones inorgánicos y compuestos polipiridínicos han llamado la atención debido a sus características estructurales y diferentes modos de interacción.³ Como una contribución al estudio de estos compuestos, en este trabajo se presentará la síntesis, caracterización de las sales $[(4-HTPI)(Cl)]$ (**1**) y $[(2-H_2TPI)(Cl_2)] \cdot 3H_2O$ (**2**), donde 4-H₂TPI = catión 2,4,5-tri(4-piridil)imidazolío y 2-H₂TPI = catión 2,4,5-tri(2-piridil)imidazolío; así como el análisis de la interacciones intra e intermoleculares (por rayos-x de monocristal y superficies Hirshfeld) presentes en dichas sales y de cómo influyen en las propiedades térmicas y luminiscentes.

Resultados y discusión

En el empaquetamiento cristalino de **1** y **2**, las interacciones intermoleculares del tipo $N^+ \cdots H \cdots Cl^-$, $N^+ \cdots H \cdots O$, $O \cdots H \cdots Cl^-$, $O \cdots H \cdots O$, $C \cdots H \cdots O$, $C \cdots H \cdots N$ y $C \cdots H \cdots Cl^-$ forman redes supramoleculares 2D, mientras que las interacciones intermoleculares $\pi \cdots \pi$ en **1** y $\pi \cdots \pi$ y $Cl \cdots \pi$ en **2** favorecen la formación de la estructura 3D. De manera interesante se observa una interacción intramolecular $N^+ \cdots H \cdots N$ en el catión 2,4,5-tri(2-piridil)imidazolío en **2** entre los anillos piridínicos de

las posiciones 4 y 5 haciendo más rígido dicho catión. Todas las interacciones mencionadas anteriormente influyen en el comportamiento luminiscente de **1** y **2** (figura 1), de tal forma que la sal **2** muestra un efecto hipercrómico y un desplazamiento batocrómico en el espectro de emisión, con respecto a la sal **1**, como consecuencia de una mayor rigidez del catión y las redes supramoleculares, debido a que hay más interacciones intermoleculares fuertes, lo que hace que probablemente disminuya la pérdida de energía de emisión por procesos radiativos en el compuesto **2**.

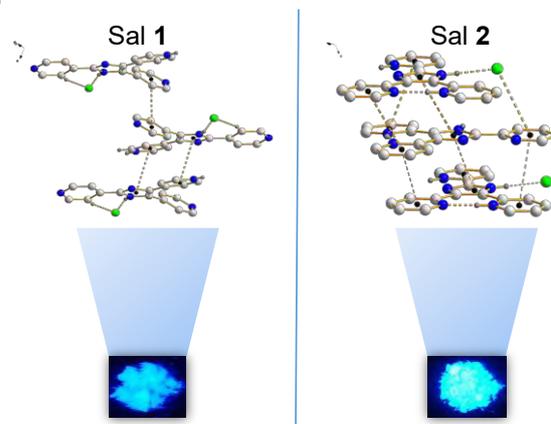


Figura 1. Emisión de las sales **1** y **2** ($\lambda_{exc}=365$ nm).

Conclusiones

Es posible obtener de manera fácil sales luminiscentes del tipo $[(4-HTPI)(Cl)]$ (**1**) y $[(2-H_2TPI)(Cl_2)] \cdot 3H_2O$ (**2**) empleando la ingeniería de cristales, para su potencial aplicación en dispositivos fotovoltaicos.

Referencias

1. D. Braga, Chem. Commun. **2003**, 22, 2751.
2. Dongpeng Y., Bhavnita P., Amit D., William J., Xue D. *Cryst. Growth Des.*, **2013**, 13, 333.
3. Lin-Rui L., Gui-Mei T., Yong-Tao W., Seik Weng N. J. *Lumin.*, **2018**, 199, 200.

SÍNTESIS, CARACTERIZACIÓN DE ROTORES MOLECULARES BODIPY'S CON POSIBLE TINCIÓN CELULAR SELECTIVA

Diego Martínez-Bourget,^a Erika Rocha,^a Pablo Labra-Vázquez,^a Rosa Santillan,^b Vianney Ortiz-Navarrete,^b Benjamín Ortiz-López^b y Norberto Farfán^{a*}

^aFacultad de Química, Departamento de Química Orgánica, Universidad Nacional Autónoma de México, 04510 México D.F., ^bDepartamento de Química, Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del IPN, Apdo. Postal 14-740, 07000, México. México. norberto.farfán@gmail.com

Introducción

Debido a su relativamente alta fotoestabilidad, carga total neutra, alto rendimiento cuántico de fluorescencia y espectros de absorción y emisión nítidos, los BODIPYs se han considerado como una potencial base estructural para el desarrollo funcional de sondas fluorescentes.^{1,2} Además, los rotores moleculares con una base BODIPY, han demostrado ser excelentes candidatos, en combinación con microscopía de imágenes de vida de fluorescencia, para proporcionar mapas de viscosidad cuantitativa de células vivas así como midiendo cambios dinámicos en la en un determinado tiempo.³ En el desarrollo de nuevos compuestos que puedan presentar selectividad a ciertos organelos celulares, se desarrollaron dos compuestos con una unidad BODIPY y estinilestradiol (EES). Dichos compuestos se caracterizaron espectroscópicamente y se realizaron pruebas de viscosidad y de tinción celular cuyos resultados se muestran a continuación.

Resultados y discusión

En el Figura 1 se muestran los compuestos sintetizados los cuales se lograron primeramente formando un dipirrometano a partir de pirrol y el aldehído correspondiente seguido de una oxidación con DDQ y la coordinación de BF₃. Posteriormente se realizó una reacción de acoplamiento C-C del BODIPY resultante con EES.

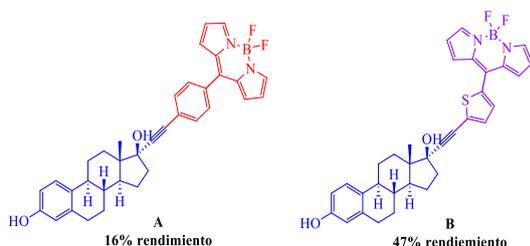


Figura 1. Compuestos BODIPY-EES sintetizados

Ambos compuestos fueron caracterizados mediante técnicas de RMN mono y bidimensionales de ¹H, ¹³C, ¹⁹F y ¹¹B, así como por espectrometría de masas, infrarrojo difracción de rayos-X de monocristal para el compuesto **B**.

Se logró encontrar una relación lineal entre el logaritmo de la intensidad fluorescente (log I) en función del logaritmo de la viscosidad (log η) para el compuesto **A** (Figura 1).

Se probaron ambos compuestos como colorantes en células MCF-7 encontrándose la internalización de dichos compuestos dentro de las células y su deposición preferente a ciertos organelos celulares empleando microscopía confocal (Figura 2).

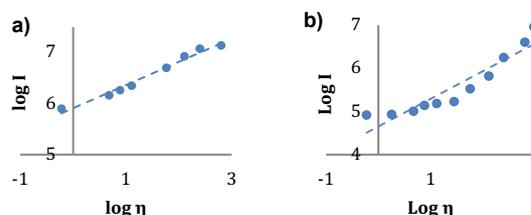


Figura 1. a) relación entre log η vs. Log I a 511 nm para **A**. R² = 0.9811 b) Log η vs. log I a 540 nm para **B**. R² = 0.874

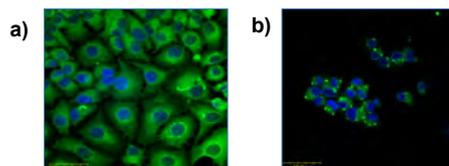


Figura 2. Imágenes de microscopía confocal de una línea celular MCF-7 con **A** y **B** (verde) λ_{ex} = 514 nm y DAPI (azul) λ_{ex} = 442 nm: a) **A** a 48 h & 50 μM b) **B** at 48 h & 50 μM.

Conclusiones

Se realizó la síntesis y caracterización de dos compuestos BODIPY-EES de los cuales, uno presenta una relación lineal de la fluorescencia en función de la viscosidad. Estos compuestos se probaron como colorantes celulares encontrándose su deposición en regiones específicas de la célula. Estudios de la región de deposición se encuentran en curso.

Referencias

1. T. Kowada, H. Maeda and K. Kikuchi, *Chemical Society Reviews*, 2015, **44**, 4953-4972.
2. A. C. Benniston and G. Copley, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2009, **11**, 4124-4131.
3. M. K. Kuimova, G. Yahioglu, J. A. Levitt and K. Suhling, *Journal of the American Chemical Society*, 2008, **130**, 6672-6673.

A COMBINED THEORETICAL AND EXPERIMENTAL STUDY OF GEOMETRICAL AND OPTICAL PROPERTIES OF THE *DTPA-AMIDE* CYCLOPHANE

Octavio Serna^a, Javier Hernández^b, Yedith Soberanes^c, Alvaro Posada-Amarillas^d, Rosa Elena Navarro^a, and José Luis Cabellos^{a*}

^aDepto. de Investigación en Polímeros y Materiales, Universidad de Sonora, Hermosillo, Son., México

^bUniversidad Veracruzana, Xalapa, Ver., México

^cCentro de Inv. en Alimentación y Desarrollo, A.C. (CIAD), Hermosillo, Son, México

^dDepto. de Investigación en Física, Universidad de Sonora, Hermosillo, Son., México
octavio.sernamed@corroea.uson.mx, jose.cabellos@unison.mx*

Introduction

Magnetic resonance imaging spectroscopy is a powerful technique for noninvasive diagnosis of human anatomy usefully providing images of the human body. At the technical level, the magnetic resonance imaging spectroscopy is made employing acid Diethylenetriaminepentaacetic (*DTPA*) with trivalent lanthanides (III) to enhance images.

Results and Discussion

As far as we know, the geometrical structure of cyclophane derivate of *DTPA* (*cy1a*)H₃ is not known. In Fig. 1 we show a skeletal structural formula as well as a possible geometrical conformation. In this work, theoretical and experimental we present the elucidation and characterization¹ of (*cy1a*)H₃ through infrared spectroscopy (IR), as shown in Fig. 2.

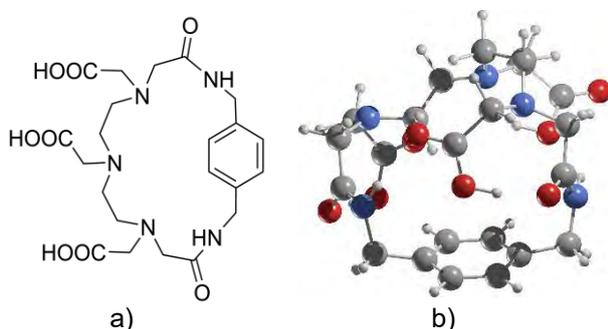


Fig. 1. a) Skeletal structural formula of cyclophane (*cy1a*)H₃ and b) Possible geometrical structure calculated by first principles. C, N, O and H atoms are depicted by gray, blue, red and white balls, respectively.

Theoretically, the geometrical structure of the (*cy1a*)H₃ is obtained using density functional theory. Thus, to search for its geometrical structure we perform first principles calculations to systematically and exhaustively explore the potential energy surface of (*cy1a*)H₃, preserving the matrix connectivity invariant. We also analyze the non-covalent interactions with the aim of understanding its structural stability.

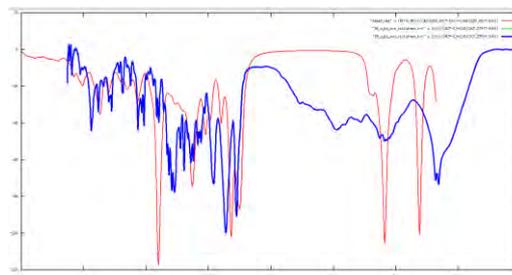


Fig. 2. Experimental (blue) vs theoretical (red) Infrared spectrum of (*cy1a*)H₃

Conclusions

We explore the potential energy surface of (*cy1a*)H₃ using density functional theory and a comprehensive stability analysis is thus given, the corresponding geometrical properties, and a comparison between the experimental and theoretical IR spectra.

References

1. Navarro R., et al., Polyhedron, 92 (2015) 105-110.

Acknowledgements

Computer resources from ACARUS high performance computing center of the Universidad de Sonora is gratefully acknowledged.

SÍNTESIS, ANÁLISIS ESTRUCTURAL Y PRUEBAS BIOLÓGICAS DE COMPLEJOS METÁLICOS QUE CONTIENEN METALOHETEROCICLOS AS (III) Y SB (III) Y UN LIGANDO DE DITIOFOSFONATO.

David Alejandro Sosa García¹, Marcela López-Cardoso¹, Gabriela Vargas-Pineda¹, Perla Román-Bravo¹, Raymundo Cea-Olivares².

¹ Centro de Investigaciones Químicas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Avenida Universidad, Chamilpa, Cuernavaca, 62210, Morelos, México.

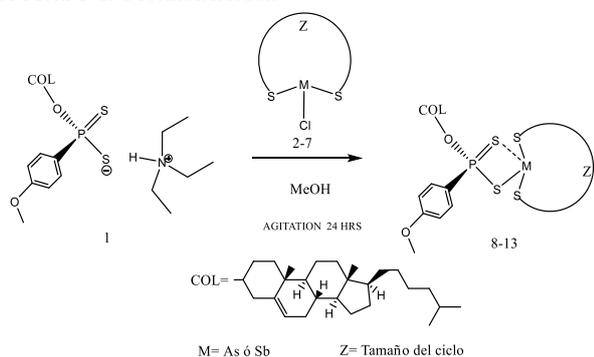
² Instituto de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, Circuito Exterior, Ciudad Universitaria, México, 04510, D.F., México. Correo: david.sosagar@uaem.edu.mx

Introducción

Los compuestos de ditio-organofosforados son interesantes debido a su amplio uso en investigación básica, así como en áreas industriales.¹⁻³ El colesterol es un pequeño esteroide rígido con un esqueleto de 5 anillos utilizado en las hormonas sexuales de los mamíferos. Es un componente de todas las membranas celulares que modulan su fluidez y especialmente su tejido, es un precursor del ácido biliar, las hormonas esteroideas y la vitamina D.⁴ En este trabajo, se sintetizó un ligando de ditiofosfonato usando colesterol como materia prima y se sintetizaron seis nuevos compuestos con metaloheterociclos de As(III) y Sb(III). Los nuevos complejos se caracterizaron por análisis elementales, IR, FAB⁺-MS y espectroscopia multinuclear de RMN (¹H, ¹³C y ³¹P) y fue posible obtener dos estructuras moleculares por análisis de difracción de rayos X de mono cristal.

Resultados y discusión

El método sintético de los compuestos **8-13** se describe a continuación:



Esquema 1 Síntesis de ditiofosfonatos **8-13**

Los compuestos **8-13** son sólidos blancos son estables a temperatura ambiente, solubles en CHCl₃, CH₂Cl₂ y tolueno e insolubles en hexano y etanol.

El espectro de RMN de ³¹P de **1** exhibe una señal sencilla en δ 105.9 ppm consistente con un compuesto de carácter iónico, de acuerdo con lo propuesto por Glidewell.⁵

Los espectros de resonancia magnética nuclear de fósforo ³¹P de los compuestos **8-13** muestran una sola señal desplazada a campo más alto a comparación de **1**. Las señales se presentan en un intervalo de δ 89.7–84.1 ppm, de acuerdo a los resultados obtenidos en resonancia magnética nuclear de fósforo ³¹P los modos de coordinación en los compuestos **8-13** son bidentados según Glidewell.⁵

La concentración mínima inhibitoria (CMI) de los compuestos fue evaluada por ensayo in vitro. La CMI muestra la menor concentración de los compuestos al cual la actividad antibacteriana fue visible. **8, 10, 11** y **13** (CMI = 14.78–58.01) fueron los más activos sobre MR *S. aureus* (ATCC 43300), *K. pneumoniae* (ATCC 700603), *E. coli* 4036 (ATCC 25922), MR *S. haemolyticus* 1036 and ESBL *E. coli* 4036. El compuesto **13** exhibe una actividad excepcional contra *S. haemolyticus* 1036 comparado con CAM y GEN.

Conclusiones

Seis nuevos complejos de ditiofosfonatos se sintetizaron con elementos del grupo 15. Los nuevos complejos y el ligando ditiofosfonato se caracterizaron por análisis elementales, IR, FAB + -MS y espectroscopia multinuclear de RMN (¹H, ¹³C y ³¹P), dos complejos fueron analizados por difracción de rayos X mostrando geometrías octaedro para **9** y pirámide de base cuadrada para **10**, también interesantes interacciones intermoleculares e intramoleculares. La coordinación de los nuevos complejos es anisobidentada confirmando lo analizado en RMN ³¹P. El complejo **8, 10, 11** y **13** tienen actividad antibacteriana.

Referencias

- Barnes A.M., Bartle K.D., Thibon V.R.A., *Tribol. Int.* **34**, **2001**, 389.
- Gaines T.B., *Toxicol. Appl. Pharmacol.* **14**, **1969**, 515.
- Bromberg L., Lewin I., Warshawsky A., *Hydrometallurgy* **33**, **1993**, 59.
- R. Ferrier Denise, *Lippincott's Illustrated Reviews: Biochemistry*, Lippincott Williams & Wilkins, E.U **2013**.
- Glidewell C. *Inorg. Chim. Acta.*, **25**, **1977**, 15.

PRESENTACIÓN CARTEL

ESTUDIO QUÍMICO Y ESTRUCTURAL DE COMPLEJOS DE ORGANOESTAÑO CON EL LIGANTE DITIOCARBAMATO DE EFEDRINA.

Aldo Samuel Ariza Roldán¹, Marcela López-Cardoso¹, Gabriela Vargas-Pineda¹, Perla Román-Bravo¹, Raymundo Cea-Olivares².

¹ Centro de Investigaciones Químicas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Avenida Universidad, Chamilpa, Cuernavaca, 62210, Morelos, México.

² Instituto de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, Circuito Exterior, Ciudad Universitaria, México, 04510, D.F., México. Correo: aldo.arizarol@uaem.mx

Introducción

Los ditiocarbamatos (DTC) son compuestos organosulfurados que son de gran interés debido a su gran variedad de aplicaciones en la agricultura, en la industria y en el sector doméstico¹⁻². Los DTC pueden estabilizar los complejos metálicos con alto y bajo número de oxidación, forman fácilmente quelatos con todos los iones metálicos a través de sus dos átomos donadores de azufre¹⁰. La efedrina es una amina simpaticomimética con efectos similares a los de la adrenalina, por lo que se toma con mayor frecuencia como un descongestivo o para la pérdida de peso y la potenciación de la energía como un suplemento dietético³.

En el presente trabajo se sintetizó un nuevo ligante ditiocarbamato a partir de la efedrina. Se sintetizaron 4 nuevos complejos de organoestaño. La caracterización de los nuevos complejos se realizó utilizando espectroscopía IR, RMN de ¹H, ¹³C y ¹¹⁹Sn, y por difracción de rayos X.

Resultados y discusión

La síntesis de los complejos 1-A, 1-B, 1-C y 1-D se presenta en el esquema 1

Posteriormente se caracterizaron los compuestos mediante espectroscopía IR, RMN de ¹H, ¹³C y ¹¹⁹Sn. En la espectroscopía IR se observa una sola señal en la banda ν C-S, Ugo y Bonati⁴ sugieren que la presencia de una sola banda en dicha región indica un modo de enlace completamente simétrico del ligante lo que indica una coordinación bidentada.

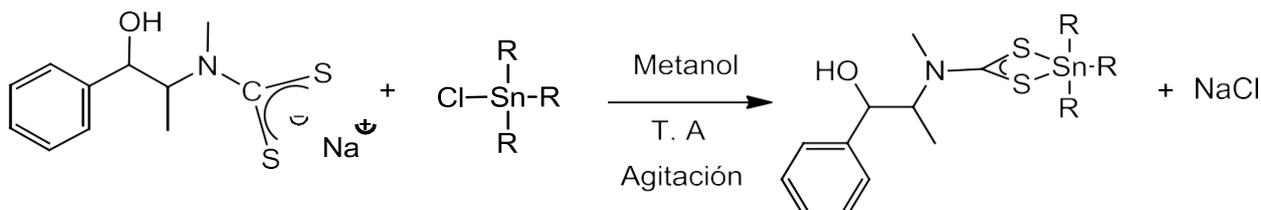
En RMN de ¹¹⁹Sn se observa una protección en el desplazamiento químico del estaño, esto debido a los grupos electrodonadores del azufre del ditiocarbamato. Los desplazamientos químicos de ¹¹⁹Sn obtenidos dan información acerca del número de coordinación del centro metálico⁵. Los 4 complejos mostraron un modo de coordinación pentacoordinado.

Conclusiones

Cuatro nuevos complejos de organoestaño se sintetizaron a partir del ditiocarbamato de efedrina. Los nuevos complejos y el ligante DTC se caracterizaron por Espectroscopía IR, RMN (¹H, ¹³C y ¹¹⁹Sn) y se obtuvo un cristal para difracción de rayos X, la coordinación de los nuevos complejos es anisobidentada con una coordinación pentacoordinada.

Referencias

- (a) Hogarth G., *Prog. Inorg. Chem.*, 53, **2005**, 71–561
(b) Rafin C., Veignie E., Sancholle M., Postal D., Len C., Villa P., Ronco G., *J. Agric. Food Chem.*, 2, **2000**, 5278–8283
- B. Cvek, Z.T. Dvorak, *Curr. Pharm. Des.*, 30, **2007**, 3155–3167
- Samenuk D, Link M.S., Homoud M.K., Contreras R., Theoharides T.C., Wang P.J., *Clin Proc* 77, **2002**, 2–16
- Bonati F., Ugo R., *J. Organometall. Chem.*, 10, **1967**, 257
- Clark H.C., Jain V.K., Mehrotra R.C., Singh B.P., Srivastava G., Birchall T., *J. Organomet. Chem.*, 219, **1985**, 385-394



Esquema 1 Síntesis de los complejos 1-(A-D), donde R= Fenilo (1-A), Ciclohexilo (1-B), nButilo (1-C) y Metilo (1-D).

PREPARACIÓN DE NANOPARTÍCULAS MAGNÉTICAS FLUORESCENTES Y SU MODIFICACIÓN CON POLÍMEROS BIOCOMPATIBLES

Arturo I. Pavón-Hernández^a, Antonio Tirado-Guizar^a, Manuel Alatorre Meda y Georgina Pina Luis

^aCentro de Graduados e Investigación en Química, Instituto Tecnológico de Tijuana, Tijuana, B.C., México.

gpinaluis@yahoo.com

Introducción

En las últimas décadas, se ha tenido un gran interés en el desarrollo de nuevos sistemas basados en nanopartículas magnéticas fluorescentes (NPMsF). Estos nanomateriales tienen aplicación potencial en biología y medicina, especialmente en la terapia y el diagnóstico.¹ En este trabajo se obtienen nanopartículas que presentan tanto propiedades magnéticas como fluorescentes y que son biocompatibles. Con este fin las NPMsF son modificadas superficialmente con polímeros biocompatibles, confiriéndoles además estabilidad y sitios de unión para la funcionalización con diferentes moléculas como: especies catalíticamente activas, diversidad de fármacos y otros grupos funcionales. Las NPMsF obtenidas fueron caracterizadas por FTIR, TGA, TEM, DLS, potencial Z y fluorescencia molecular.

Como primera etapa se describe la preparación y caracterización de nanopartículas magnéticas modificadas con aminoácidos L-Lisina (L-Lys), L-Arginina (L-Arg) y Glicina (Gly) para la incorporación de puntos cuánticos (QDs) por enlace covalente mediante reacción de amidación (Figura 1).

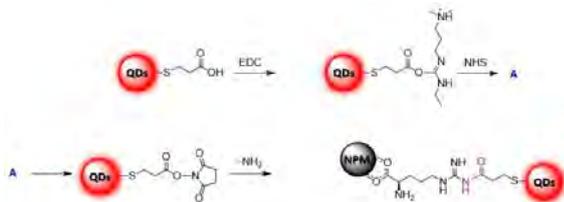


Figura 1. Obtención de nanopartículas magnéticas fluorescentes mediante una reacción de amidación.

Por otra parte, la incorporación de biopolímeros sobre las NPMsF se llevó a cabo utilizando una estrategia supramolecular por la técnica de capa por capa,² empleando alginato de sodio y poli cloruro de dimetil amonio (Polidadmac) (Figura 2).



Figura 2. Incorporación de polímeros en NPMsF mediante la técnica de capa por capa.

Resultados y discusión

En la Figura 3 se muestra el espectro de FT-IR de las NPMsF modificadas, mostrando las vibraciones de estiramiento que demuestran la formación del enlace amida.

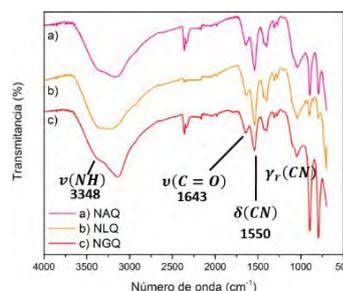


Figura 3. Espectros de FT-IR de NPMF: a) NPMs-Arg@QDs (NAQ), b) NPMs-Lys@QDs (NLQ) y c) NPMs-Gly@QDs (NGQ).

En la Figura 4 se muestra el estudio de potencial Z que demuestra la incorporación de 5 capas de polímeros sobre la superficie de las NPMsF mediante una estrategia supramolecular.

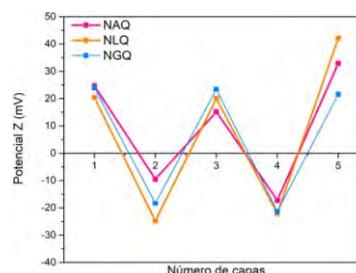


Figura 4. Potencial Z de 5 capas de polímero de NPMsF biocompatibles.

Conclusiones

- Se demostró la obtención de NPMsF utilizando amino ácidos como agentes espaciadores mediante una reacción de amidación.
- Se demostró la incorporación de 5 capas de polímeros biocompatibles en la superficie de las NPMsF.

Referencias

1. Fan, Z.; Fu, P. P.; Yu, H.; Ray, P. C. *J. Food Drug Anal.* **2014**, *22*, 3–17.
2. Lin, M.; Gao, Y.; Diefenbach, T. J.; Shen, J. K.; Hornicek, F. J.; Park, Y. I.; Xu, F.; Lu, T. J.; Amiji, M. M.; Duan, Z. *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2017**, *9*, 7941–7949.

DISEÑO DE MATERIALES POROSOS DE BORO PARA EL ALMACENAMIENTO DE FARMACOS E HIDROCARBUROS: ESTUDIO TEÓRICO

Diego Sebastián Martínez Hernández^a, Luis Ángel Aguilar Gálvez^a, Melissa Aimee Wade Laurent^a, José Benito Pelayo Vázquez^a e Iran Fernando Hernández Ahuactzi^a

^a Centro Universitario de Tonalá, Universidad de Guadalajara, Av. Nuevo Periférico 555, Ejido San José Tatepozco, C.P. 45425, Tonalá Jalisco, México. I.Fernando.Hernandez@cutonala.udg.mx

Introducción

La formación de nuevos materiales con cavidades o poros son de interés debido a las potenciales aplicaciones que pueden tener como: tamices moleculares,^{1a} desecantes,^{1b} en intercambio de iones,^{1c} en catálisis heterogénea,^{1d} en almacenamiento de fármacos^{1e} y almacenaje de gases contaminantes.^{1f} En este sentido una opción para generar este tipo de materiales mediante reacciones sencillas y de pocos pasos de reacción, es el uso del enlace dativo Nitrógeno-Boro formado en la reacción ácido-base de Lewis entre los esteres borónicos y ligantes nitrogenados que da origen a estructuras discretas, macrocíclicas, poliméricas y redes tridimensionales de boro.^{2a} Los esteres borónicos son obtenidos a partir de la reacción de condensación entre ácidos arilborónicos y catecol. Debido a que los esteres borónicos son buenos ácidos de Lewis que pueden formar aductos con bases de Lewis como la piridina, la formación del aducto va acompañado por un cambio en la geometría del átomo de boro de trigonal plana a tetraédrica (figura 1).^{2b}

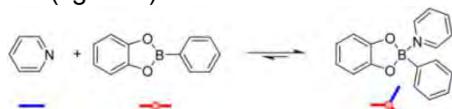


Figura 1. Formación de un aducto entre la piridina y el éster borónico.³

Resultados y discusión

Los resultados teóricos muestran que el éster tetra-borónico en combinación con diferentes bipyridinas, son capaces de formar estructuras tridimensionales porosas y que es posible llevar a cabo la modulación de las poros mediante el uso de diferentes bipyridinas y ácidos tetra-borónicos en los cuales se ha incrementado la distancia entre los átomos de boro en el éster borónico y los átomos nitrógeno que se coordinan con los átomos de boro. Una vez formados los compuestos porosos se realizó un estudio del almacenamiento de paracetamol, naproxeno, *n*-octano, *iso*-octano (2,2,4-trimetilpentano) y el 2,2,3,3-tetrametilbutano

en los compuestos porosos 1 al 6 (figura 2), y se encontró por medio del estudio teórico que es favorable almacenar los fármacos propuestos y además absorber de manera selectiva el *n*-octano en todos los compuestos y que la capacidad de almacenamiento va desde 2 moléculas para el compuesto 1 y hasta 5 moléculas para el compuesto 6 en los poros formados. Todos los compuestos fueron optimizados utilizando el funcional B3LYP en combinación con el conjunto base 6-31g(d), utilizando el programa Gaussian 09. Todas las estructuras son mínimos verdaderos y se caracterizaron con el mismo método de cálculo.

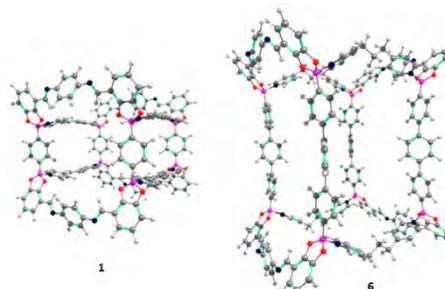


Figura 2. Formación de los compuestos tridimensionales porosos de boro.

Conclusiones

Los nuevos compuestos de boro calculados en el presente trabajo son capaces de almacenar fármacos y el *n*-octano de manera preferencial en sus poros y los cálculos teóricos muestran que es posible llevar a cabo la modulación en el tamaño de los poros mediante el incremento de la distancia de los átomos de Nitrógeno de las bipyridinas y de los átomos de Boro en los esteres tetra-borónicos.

Referencias

- a) Maji, T.K.; Mostafa, G.; Matsuda, R.; Kitagawa, S. *J. Am. Chem. Soc.*, **2005**, 127, 17152. b) Seo, J. S.; Whang, D.; Lee, H.; Jun, S.I.; Oh, J.; Jeon, Y.J.; Kim, K. *Nature*, **2000**, 404, 982. c) Soloway, A.H.; Tjarks, W.; Barnum, R.A.; Rong, F.G.; Barth, R.F.; Codogni, I.M.; Wilson, J.G.; *Chem. Rev.*, **1998**, 98, 1515. d) Evans, O.R.; Lin, W.; Braga, D. *Acc. Chem. Res.*, **2002**, 35, 511. e) Wu, C.D.; Hu, A.; Zhang, L.; Lin, W. *J. Am. Chem. Soc.*, **2005**, 127, 8940. f) Haszeldin, R.S. *Science*, **2009**, 325, 1647.
- a) Kubo, Y.; Nishiyabu, R.; James, T.D. *Chem. Commun.*, **2015**, 51, 2005. b) Luisier, N.; Bally, K.; Scopelliti, R.; Fadaei, F.T.; Schenk, K.; Pattison, P.; Solari, E.; Severin, K. *Cryst. Growth Des.*, **2016**, 16, 6600.

ESTUDIO COMPARATIVO DE LOS COMPLEJOS DE Cu^{2+} y Fe^{3+} DE UN AZA-CICLOFANO, Y SU ANÁLOGO DE CADENA ABIERTA

Rocio Sugich-Miranda^a, Melissa Beltrán Torres^b y Hisila Santacruz Ortega^b

^aDepartamento de Cs. Químico Biológicas, Universidad de Sonora, Hermosillo, México; ^bDepartamento de Inv. en Polímeros y Materiales, Universidad de Sonora, Hermosillo, México. rocio.sugich@unison.mx

Introducción

El uso de compuestos de coordinación como agentes terapéuticos ha mostrado un progreso significativo en su uso para tratar varias enfermedades humanas como carcinomas, linfomas, diabetes, enfermedades neurológicas entre otras [1]. Existen líneas de investigación que estudian las propiedades biomiméticas que estos compuestos puedan tener, tal es el caso de los complejos de Cu^{2+} y Fe^{3+} a partir de ciclofanos binucleares previamente reportados en donde evaluaron la capacidad antioxidante, la actividad biomimética SOD y POx con buenos resultados [2]. El uso de compuestos de coordinación con fines farmacológicos no es una tarea sencilla de realizar, ya que varios factores afectan la estabilidad de estos compuestos como el tipo de átomos donadores del ligante, el tamaño de la cavidad, el catión en solución, el pH y las energías de unión de complejación[3]. Por lo anterior, el objetivo es evaluar la topología de cuatro ligandos derivados de EDTA (Figura 1) y los iones Cu^{2+} y Fe^{3+} en la formación de compuestos de coordinación y su posible uso como agentes biomiméticos de SOD y POx.

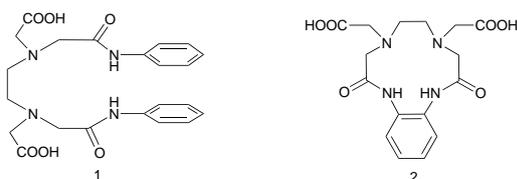


Figura 1. Ligandos con los que se formarán los compuestos de coordinación (1) BZ y (2) OD.

Resultados y discusión

Se obtuvo el cristal del ligante Bz, y su análisis por Rayos x se presenta en la Figura 2

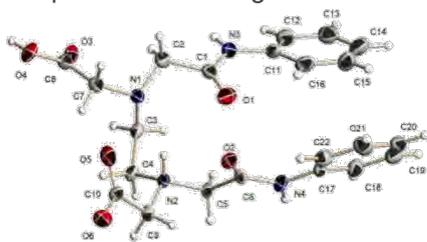


Figura 2. Estructura del ligante BZ
La formación de los complejos metálicos se monitoreó por espectrometría de masas, infrarrojo y

xps (para observar el estado de oxidación que presenta el metal en el complejo así como por calorimetría de titulación isotérmica.

Los espectros de infrarrojo se presentan en la Figura 3

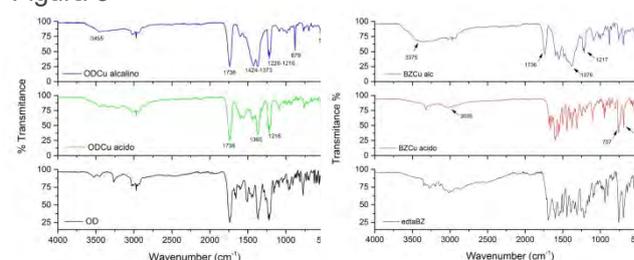


Figura 3. Espectros IR de los ligandos BZ y OD y sus compuestos de coordinación con Cu^{2+} y Fe^{3+} .

Por motivo de espacio, los datos y figuras obtenidos a través de las demás técnicas serán discutidos durante la presentación del poster.

Conclusiones

A la fecha se ha logrado una caracterización muy completa de los ligandos OD y Bz así como de sus complejos metálicos con resultados interesantes al momento de hacer comparaciones, por ejemplo que no necesariamente OD muestra mayor estabilidad en el complejo formado, como se hubiera esperado debido al efecto macrocíclico. A partir de datos como el cristal de rayos x de BZ se concluye que al ser una molécula pequeña parece que prefiere una conformación preorganizada, similar a la del macrociclo correspondiente.

Referencias

- [1] Rafique, S.; Idrees, M.; Nasim, A.; Akbar, H.; Athar, A. Transition metal complexes as potential therapeutic agents. *Biotechnol. Mol. Biol. Rev.* 2010, 5, 38–45.
- [2] Salazar-Medina, A. J. y col (2013). Antioxidant capacity of two novel bioactive Fe(III)-cyclophane complexes. *Molecules*, 18(2), 1762–1774; Sugich-Miranda, R., y col (2010). Antioxidant capacity of binuclear Cu(II)-cyclophanes, insights from two synthetic bioactive molecules. *Journal of Biochemical and Molecular Toxicology*, 24(6), 379–383.
- [3] Turnbull, W. B., & Daranas, A. H. (2003). On the Value of c: Can Low Affinity Systems Be Studied by Isothermal Titration Calorimetry? *Journal of the American Chemical Society*, 125(48), 14859–14866; Gispert, J. R. (2000). *Química de coordinación*. Barcelona: Omega; Inoue, M. B., Machi, L., Muñoz, I. C., Rojas-Rivas, S., Inoue, M., & Fernando, Q. (2001). Metal–ligand interactions in benzodioxotetraaza-macrocyclic metal chelates. *Inorganica Chimica Acta*, 324(1–2), 73–80.

SÍNTESIS DE NANOCLUSTERS DE Ag RECUBIERTOS CON POLIETILENIMINA Y SU APLICACIÓN COMO POSIBLE SENSOR DE IONES METÁLICOS Y EL pH

Ana Patricia Reyes Cruzaley^a y Georgina Pina Luis^a

Laboratorio de Nanosensores Ópticos, Tecnológico Nacional de México/Instituto Tecnológico de Tijuana^a, Tijuana, México

gpinaluis@yahoo.com

Introducción

Los Nanoclusters (NCs) metálicos están constituidos por unos pocos a cientos de átomos, con tamaños comparables a la longitud de onda de Fermi y cuyas propiedades están entre los átomos metálicos individuales y las nanopartículas plasmónicas. En estas dimensiones, el confinamiento cuántico es tan fuerte que genera niveles de energía discretos, ocasionando que los NCs presenten propiedades nuevas que no poseen las nanopartículas, como una fotoluminiscencia fuerte.¹

En los últimos años, el descubrimiento de los NCs metálicos ha llamado el interés para el desarrollo de una clase nueva de sensores, ya que además de sus propiedades fluorescentes, presentan una fotoestabilidad mayor que los fluoróforos orgánicos convencionales y una toxicidad menor que los semiconductores nanocristalinos.²

En este trabajo se sintetizan NCs de Ag recubiertos con polietilenimina (PEI) y se estudian sus propiedades como sensor de iones metálicos y el pH.

Resultados y discusión

Los NCs de Ag se sintetizaron utilizando AgNO₃ y PEI como ligando estabilizante por un método hidrotérmico (Figura 1).³ Las condiciones de síntesis se optimizaron, variando las concentraciones del precursor metálico, agente reductor, polímero y el tiempo de reacción.

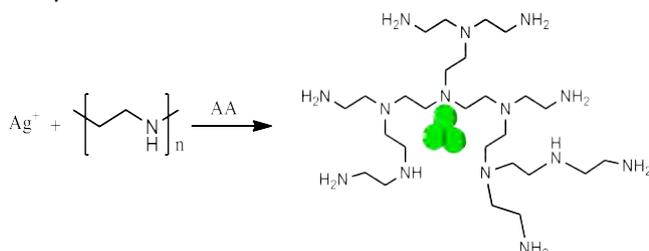


Figura 1. Esquema general de la síntesis de NCs de Ag.

El análisis de los NCs por dispersión de luz dinámica muestra una distribución de tamaños de 0.71 a 3.1 nm. Los espectros de fluorescencia presentan una banda de emisión, dependiente del tamaño que va desde 488 a 516 nm.

Se estudió la respuesta en la intensidad de fluorescencia de los NCs frente a iones metálicos diferentes, encontrando un abatimiento de la señal analítica para iones Cu²⁺ y Fe³⁺. Para estos últimos, se obtuvo una constante de abatimiento mayor. En la figura 2, se muestran los espectros de emisión de los NCs en presencia de Fe³⁺ en un intervalo de concentraciones de 0 a 0.16 mM.

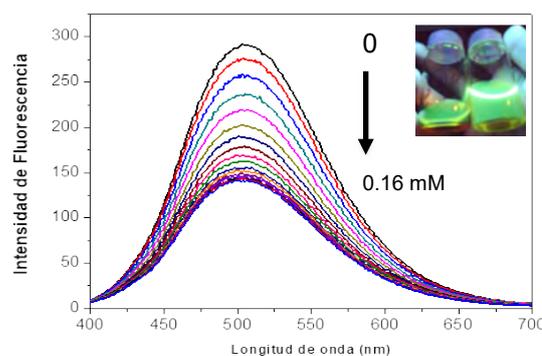


Figura 2. Espectros de emisión de NCs de Ag en presencia de Fe³⁺. Inserto: Fotografías bajo luz UV de los NCs.

Conclusiones

Se obtienen NCs de Ag recubiertos con PEI, los cuales tienen potencial como nanosensor para la detección de iones Fe³⁺ y el pH. El abatimiento de fluorescencia de los NCs muestra una dependencia lineal con la concentración de Fe³⁺ entre 0 – 1 μM y un coeficiente de correlación R²= 0.9923. Los NCs son solubles en agua, fotoestables y de baja toxicidad, por lo que presentan características excelentes para el marcaje biológico.

- Díez, I.; Ras, R. H. A. *Nanoscale* **2011**, 3, 1963-1970.
- Díez, I.; Ras, R. *Advanced Fluorescence Reporters in Chemistry and Biology II*, Springer, 2010, pp. 307-332.
- Xu, N.; Li, H. W.; Wu, Y. *Anal. Chim. Acta* **2017**, 958, 51-58

ESTUDIO DEL LIGANTE 1-(4-HIDROXIFENIL)-3-(4-NITROFENIL) TIUREA COMO SENSOR COLORIMETRICO PARA EL ION FLUORURO EN SOLUCIÓN Y SOPORTADO EN UN POLIMERO

Hisila Santacruz^a, Bruno Zavala^a, Rocío Sugich^b y Rosa Elena Navarro^a

^a Departamento de Investigación en Polímeros y Materiales, Universidad de Sonora, Hermosillo, Sonora, México;

^b Departamento de Ciencias Químico Biológicas, Universidad de Sonora, Hermosillo, Sonora, México.

hisila@polimeros.uson.mx

Introducción

En años recientes se ha encontrado que el consumo prolongado y en concentraciones altas de flúor en agua resulta en problemas en la salud, donde las principales enfermedades son la fluorosis dental y esquelética. El límite máximo de fluoruros en agua según la Organización Mundial de la Salud (OMS) es de 1 mg/L para poder ser consumida; sin embargo en México la NOM-013-SSA2-2006 indica el límite máximo de 0.7 mg/L. Los sensores colorimétricos se han convertido en herramientas con un alto nivel de sensibilidad y selectividad para la detección y cuantificación de iones en solución acuosa y fisiológica, las cuales se pueden utilizar en ámbitos tanto ambientales, de la salud, científicos e industriales. En este trabajo se reporta el estudio de detección del ion fluoruro en medio acuoso por la molécula 1-(4-hidroxifenil)-3-(4-nitrofenil)tiourea (**1**) (Figura 1) en solución y soportado en la resina tentagel.

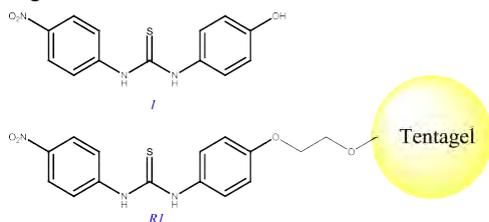


Figura 1.

Resultados y Discusión

El receptor **1** se obtuvo de la reacción de p-aminofenol con p-nitroisotiocianato. El receptor **1** se caracterizó por RMN, IR, UV-Vis y p.f. Posteriormente **1** se soportó en la Resina Tentagel para obtener el producto **R1**. Se caracterizó por IR y RMN.

El estudio de reconocimiento de la molécula en solución se realizó por UV-Vis y RMN de ¹H. En los estudios el Receptor se colocó en DMSO y la solución del ion F⁻ en medio acuoso. En el estudio por UV-Vis se encontró la aparición de una banda centrada a 472 nm, además de cambio de color de transparente a rojizo, al ir aumentando la concentración de F⁻. Esto atribuido a la banda de

transferencia de carga que se forma por la desprotonación del grupo tiourea[1-3]. En la Figura 2 se presentan los espectros de RMN obtenidos a las relaciones de [F⁻]/[**1**] entre 0 y 3.5. Se observó un cambio de desplazamiento de los protones, además del cambio de color.

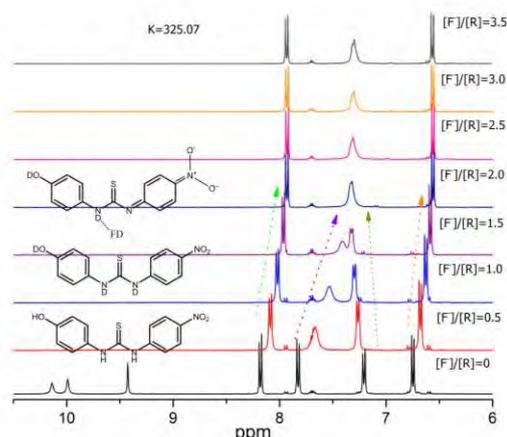


Figura 2. Espectros de RMN ¹H de **1** a diferentes relaciones de TEAF. [**1**]=10 mmol en DMSO-d₆.

El estudio de reconocimiento en **R1**, presentó cambios de color dependiendo de la concentración de los iones F⁻ (Figura 3).

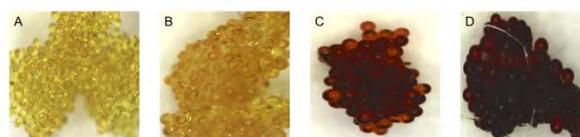


Figura 3. **R1** a diferentes concentraciones de F⁻ A=0, B=0.001, C=0.01 y D=0.1.

Conclusiones

Se preparó un polímero sensor colorimétrico para la detección de iones F⁻ en agua, por el proceso de transferencia de carga.

Referencias

1. F.M. Hinterholzinger, B. Rühle, S. Wuttke, K. Karaghiosoff, and T. Bein, Sci. Rep. 3, 2562 (2013).
2. V. Amendola, L. Fabbrizzi, and L. Mosca, Chem. Soc. Rev. 39, 3889 (2010)
3. Y. Zhou, J.F. Zhang, and J. Yoon, Chem. Rev. 114, 5511 (2014).

SÍNTESIS Y APLICACIONES CATALÍTICAS DE COMPLEJOS DE Ir(III) Y Rh(III) CON LIGANDOS TRIAZENURO FUNCIONALIZADOS CON QUINOLINA O IMIDAZOL

Gabriela Ortega-Torres,^a Miguel Parra-Hake^a y Valentín Miranda-Soto^{a,*}

^a Centro de Graduados e Investigación en Química, Tecnológico Nacional de México/I.T. Tijuana, Tijuana, B.C., México. vmiranda@tectijuana.mx

Introducción

La investigación en el desarrollo de complejos organometálicos con uso potencial en catálisis ha prestado especial interés al diseño de ligandos capaces de estabilizar centros metálicos y modular sus propiedades. En este sentido, los ligandos triazenuro han recibido atención debido a su versatilidad de coordinación (A-E) y a la posibilidad de modular el factor electrónico y estérico de sus sustituyentes (Figura 1).²

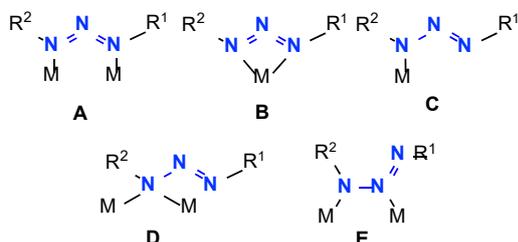
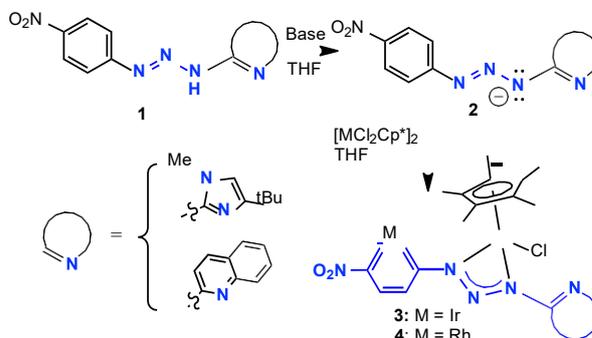


Figura 1. Modos de coordinación del triazenuro.

En este contexto, los triazenuros funcionalizados con heterociclos plantean una atractiva propuesta pues una vez coordinados a los centros metálicos tendrían la capacidad de comportarse como una base de Lewis colgante. Esta característica estructural podría favorecer la presencia de interacciones intermoleculares importantes en el reconocimiento molecular de substratos, las cuales permitirían la activación de etapas esenciales en el inicio de un proceso catalítico y la eventual transformación del sustrato.

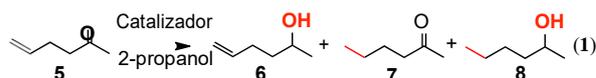
Resultados y discusión

La metodología empleada para la obtención de los complejos (**3** y **4**) consistió en desprotonar el triazeno con una base. Posteriormente, se llevó a cabo una reacción de transmetalación con el triazenuro (**2**) y el dímero $[MCl_2Cp^*]_2$, la cual condujo a la formación de **3** y **4** (Figura 1). Las estructuras de **3** y **4** fueron elucidadas por difracción de rayos X y completamente caracterizadas por Resonancia Magnética Nuclear y Espectrometría de Masas. Adicionalmente, se exploró las propiedades catalíticas de los complejos **3** y **4** en reacciones de hidrogenación de acetofenona y 5-hexen-2-ona.



Esquema 1. Síntesis de complejos.

Los complejos (**3** y **4**) catalizaron la reacción de hidrogenación de acetofenona incluso en ausencia de base y utilizando 2-propanol como fuente de hidrógeno. Adicionalmente, los complejos mostraron tener un comportamiento dual en la hidrogenación de la 5-hexen-2-ona, ya que en ausencia de base hidrogenan selectivamente al enlace doble, mientras que en presencia de base hidrogenan selectivamente al grupo carbonilo (Ecuación 1).



Conclusiones

Los complejos **1** y **2** catalizaron las reacciones de hidrogenación de acetofenona y 5-hexen-2-ona. En el caso de la hidrogenación de la 5-hexen-2-ona, los complejos tienen un comportamiento dual que permite controlar la selectividad en función del tiempo de reacción para obtener **6**, **7** u **8**. Por otra parte, las reacciones que se llevaron a cabo en ausencia de una base ponen en evidencia la capacidad de los heterociclos en los ligandos triazenuro para comportarse como bases de Lewis y acelerar las reacciones catalíticas.

Referencias

- Hauber, S.O.; Lissner, F.; Deacon, G.B.; Niemeyer, M. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2005**, *44*, 5871-5875.
- Kimbal, D.B.; Haley, M.M.; *Angew. Chem. Int. Ed.* **2002**, *41*, 3338-3351.

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN ESTRUCTURAL DE DOS OXALAMIDAS TIPO PINZA A PARTIR DE LA 2,6-DIAMINOPIRIDINA

Preciado-Maldonado C.E.^a, Magaña-Vergara N.E.^a, Farfán-García N.^b y Martínez-Martínez F.J.^{a*}

^aLaboratorios de Posgrado de la Facultad de Ciencias Químicas, Universidad de Colima, Km. 9 Carretera Colima-Coquimatlán, Coquimatlán, Colima, C.P. 28400. ^bLab de Química Orgánica, Facultad de Química, UNAM, Cd.

Universitaria. Correo: fjmartin@ucol.mx; carlos_maldonado@ucol.mx

Introducción

Las pinzas moleculares se han convertido en un área de interés, debido a que son capaces de tener un movimiento controlado a nivel molecular. Estos compuestos se caracterizan por tener cavidades que permiten tener la función como receptor y tener unión con un huésped mediante diferentes interacciones supramoleculares, tales como coordinación con metales, puentes de hidrógeno, fuerzas de Van der Waals, efectos electrostáticos y/o interacciones $\pi-\pi$.²

Las oxalamidas son compuestos orgánicos de fórmula $(\text{CONH}_2)_2$ los cuales forman puentes de hidrógeno inter e intramoleculares, que permiten evaluar el efecto de diferentes aceptores (Figura 1).^{1,3}

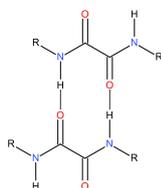
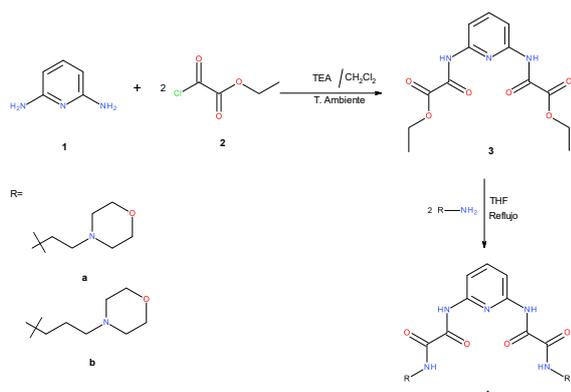


Figura 1. Estructura química de oxalamidas.

Resultados y discusión

El dietil 2,6-dioxalamato-piridina se preparó a partir de la condensación del 2,6-diaminopiridina con cloroacetato de etilo y trietilamina (TEA) a temperatura ambiente durante 24 horas.⁴ El compuesto **3** se condensa con la 2-aminoetil mofolina y la 3-aminopropil morfolina para obtener los compuestos **4a** y **4b** respectivamente. (Esquema 1).



Esquema 1. Esquema general de síntesis de derivados de 2,6-bis-oxalamidas-piridinas

Los compuestos obtenidos se caracterizaron mediante RMN de ¹H y ¹³C (Figura 2). El compuesto **4a** cristalizó y se le realizó un análisis preliminar de difracción de rayos, se obtuvo una celda unitaria triclinica con un grupo espacial *p21/c* X y se observó que el acomodo de las moléculas tiende a formar una hélice, que es debido a la formación de puentes de hidrogeno intermoleculares entre el oxígeno de los carbonilos y N-H de las amidas (Figura 3).

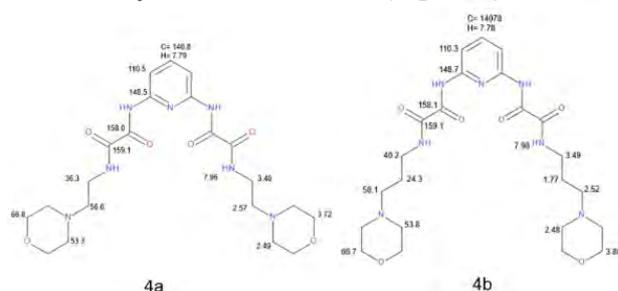


Figura 2. Desplazamientos químicos de RMN de ¹H y ¹³C de los compuestos **4a** y **4b** (δ = ppm, disolvente CDCl_3)

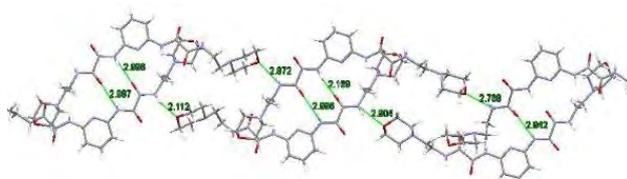


Figura 3. Estructura supramolecular del compuesto **4a**.

Conclusiones

Se sintetizaron 2 nuevos bis-oxalamidas derivadas de la 2,6-diaminopiridina que se caracterizaron por RMN de ¹H y ¹³C. Se obtuvo un cristal del compuesto **4a** al cual se le realizó un análisis preliminar de difracción de rayos X.

Referencias

- Hernández-Díaz, Julio, Carvajal-García, Antonia., Padilla-Martínez, Itzia I., Martínez-Martínez, Francisco J., Montero-Vázquez, Erick F., New bis-oxalamides from trans-1,2-diaminocyclohexane. 2008. ARKIVOC (v), Pag.276-282
- Lerouge Hardouin-Marie, H. P. (2011). Molecular clips and tweezers hosting neutral guests. Chemical Society Reviews, Pag. 452
- Martínez-Martínez, Francisco J., Padilla-Martínez, Itzia I., Brito, M. A. Three-center intramolecular hydrogen bonding in oxamide derivatives. Chem. Soc.; 2001.Perkin Trans. 2, Pag. 1817-1823
- Padilla-Martínez, Itzia I., Martínez-Martínez, Francisco J., Guillén-Hernández, Cristian I., Chaparro-Huerta, M., Cabrera-Pérez, Laura C., Gómez-Castro, Carlos Z. García-Lopez-Romero Beatriz A., Báez, Efrén V. (2005). Switching from twisted to planar oxalamide molecular clefts through intramolecular three centered hydrogen bonding. Arkivoc, 6, Pag. 401-415.

SÍNTESIS DE BODIPYs CON POSIBLE APLICACIÓN EN OPTOELECTRÓNICA

Mónica Farfán-Paredes^a, Norberto Farfán^a, Diana Tahuilán^a, Andrés Arroyo^b y Jorge Peón^b

^aFacultad de Química. Departamento de Química Orgánica, Universidad Nacional Autónoma de México. Ciudad de México, México; fpmonica5@hotmail.com

^bInstituto de Química. Universidad Nacional Autónoma de México. Ciudad de México, México.

Introducción

El estudio de una gran variedad de BODIPYs ha sido un campo de interés en la comunidad científica debido a sus interesantes propiedades como buena absorción en la zona del visible, rendimientos cuánticos de fluorescencia modulables, altos coeficientes de extinción molar y buen transporte de carga.^{1,2} Debido a su versatilidad química una gran variedad de sustituyentes pueden ser introducidos en su estructura modulando sus propiedades para su potencial aplicación en optoelectrónica.³⁻⁵

Resultados y discusión

En el presente trabajo se discutirá el análisis del empaquetamiento cristalino que muestran dos BODIPYs meso sustituidos **1** y **2** (Figura 1). Las interacciones que rigen el empaquetamiento del BODIPY **1** son del tipo CH...F (2.4 Å), mientras que en el BODIPY **2** son principalmente enlaces hidrógeno del tipo OH...O (1.9 Å), CH...F (2.5 Å) y CH...O (2.6 Å).

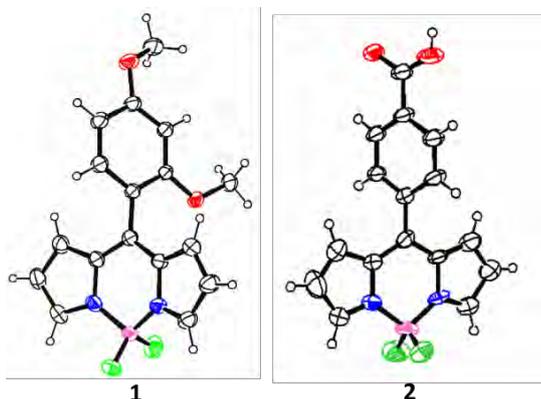


Figura 1. Estructuras de rayos X de **1** y **2**

Además se presentará el estudio de sus propiedades ópticas en disolución como absorción, rendimiento cuántico de fluorescencia en distintos disolventes y el band-gap óptico, que son parámetros importantes a tomar en cuenta para su posible aplicación en el campo de la optoelectrónica, mostraron que el BODIPY **1** por tener un sustituyente en orto al fenilo presenta una restricción en la libre rotación sobre la posición meso lo que se ve reflejado en un aumento del

rendimiento cuántico comparado con el BODIPY **2**, además el espectro de RMN-¹⁹F del BODIPY **1** muestra que los átomos de flúor no son equivalentes (Figura 2).

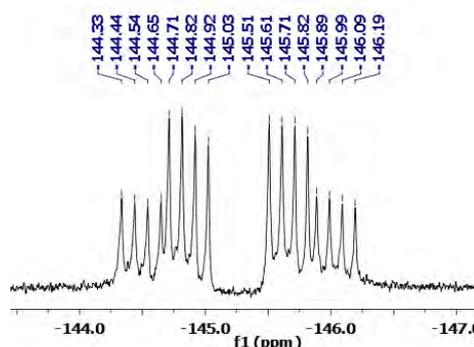


Figura 2. RMN-¹⁹F [282 MHz, CDCl₃] del BODIPY **1**

Conclusiones

Las interacciones que rigen el empaquetamiento de los BODIPYs son principalmente enlaces de hidrógeno. El BODIPY **1** presentó un aumento en el rendimiento cuántico debido a la restricción de giro del sustituyente en *meso*, lo que se observa en la RMN-¹⁹F en donde se muestra 16 señales, debido a que los átomos de flúor no son equivalentes.

Referencias

- (1) Loudet, A.; Burgess, K. *Chem. Rev.* **2007**, *107*, 4891–4932.
- (2) Ozdemir, M.; Choi, D.; Kwon, G.; Zorlu, Y.; Cosut, B.; Kim, H.; Facchetti, A.; Kim, C.; Usta, H. *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2016**, *8*, 14077–14087.
- (3) Corona-Sánchez, R.; Arcos-Ramos, R.; Maldonado-Domínguez, M.; Amelines-Sarria, O.; Jerezano-Domínguez, A.; García-Ortega, H.; Rivera, M.; Del Pilar Carreón-Castro, M.; Farfán, N. *Monatshefte fur Chemie* **2016**, *147*, 1915–1923.
- (4) Xochitlotzi-Flores, E.; Jiménez-Sánchez, A.; García-Ortega, H.; Sánchez-Puig, N.; Romero-Ávila, M.; Santillan, R.; Farfán, N. *New J. Chem.* **2016**, *40*, 4500–4512.
- (5) Xochitlotzi-Flores, E.; Islas-Mejía, A. A.; García-Ortega, H.; Mendez-stivalet, J. M.; Romero-Ávila, M.; Santillan, R.; Maldonado-Domínguez, M.; Carreón-Castro, P.; Arcos-Ramos, R.; Farfán, N. *J. Organomet. Chem.* **2016**, *805*, 148–157.

SÍNTESIS, CARACTERIZACIÓN Y ESTUDIOS DE COMPUESTOS POLIAZAMACROCICLICOS

López-Martínez Luis Miguel^{a,b}, Santacruz-Ortega Hisila^a, Navarro Rosa Elena^a, Caro-Leon Javier^{a,c},
^aPrograma Educativo de Ingeniería Industrial en Manufactura, Universidad Estatal de Sonora (UES), Unidad Académica Hermosillo, Hermosillo, Sonora, México; ^bDepartamento de Investigación en Polímeros y Materiales (DIPM), Universidad de Sonora, Hermosillo, Sonora, México. ^cCentro de Investigación en Alimentación y Desarrollo (CIAD), A.C., Hermosillo, Sonora, México. luismiguellopezmartinez@gmail.com

Introducción

Los ligandos macrocíclicos tipo poliaza con brazos funcionales pendientes amida, ácidos carboxílicos o ésteres, y los complejos metálicos que estos forman, tienen gran interés debido a las propiedades químicas que presentan y a sus potenciales aplicaciones en distintas áreas, en las que destacan la medicina terapéutica y la de diagnóstico, catálisis y como modelos biomiméticos de enzimas. [1,2] Los complejos metálicos de Cu^{2+} , Zn^{2+} , Mn^{2+} y Fe^{3+} , presentan propiedades químicas que dependen del tipo de coordinación, la cual es influenciada por la naturaleza de los brazos funcionales pendientes. [3] En este trabajo, se muestra la síntesis, caracterización y estudios de distintos compuestos poliazamacrocíclicos (Figura 1), con el fin de tener complejos metálicos que sirvan como modelo de estudio de metaloproteínas y como agentes antioxidantes.

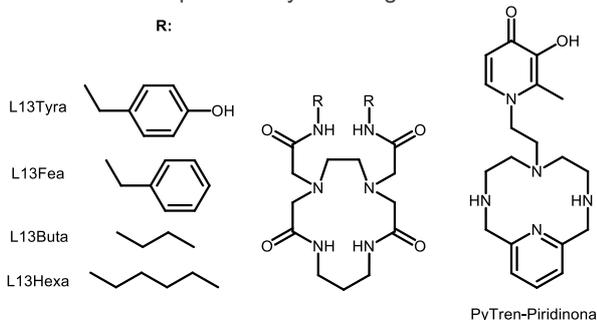


Figura 1. Ligandos poliazamacrocíclicos sintetizados.

Resultados y discusión

Estudio de Coordinación de los ligante poliazamacrocíclicos con Iones de Cu^{2+}

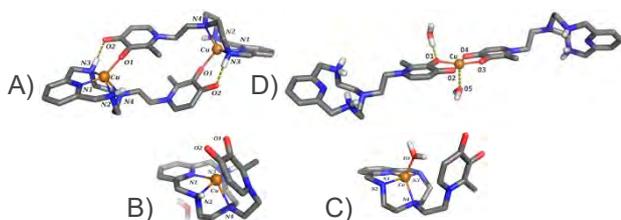


Figura 2. Estructuras de mínima energía optimizadas con DFT de: A) $[\text{Cu}(\text{HL})_2]^{4+}$, B y C) $[\text{Cu}(\text{H}_1\text{L})_2]^{4+}$ y D) $[\text{Cu}_2(\text{H}_1\text{L})_2]^{2+}$

Estudios de coordinación de histamina con complejos de Cu^{2+}

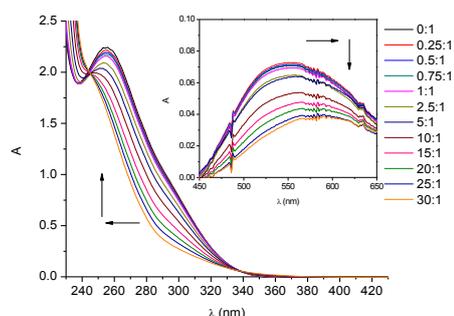


Figura 3. Espectros electrónicos de la titulación del complejo $[\text{CuL13Buta}]_0 [5 \times 10^{-4}]$ con histamina en Buffer Trizma (pH 7.2).

Conclusiones

En este estudio se ha demostrado que el tipo de geometría de coordinación que adopta un ligante hacia un ion metálico es dependiente a ciertas características estructurales propias del ligante y del ion metálico. Sin embargo, este comportamiento de coordinación no solo depende estas características sino del medio que rodea al sistema. Los estudios realizados de coordinación de iones Cu^{2+} muestran que el ligante L13Tyra presenta dos estequiometrías; en solución 2:1 (M:L), mientras que en estado sólido cuando se hace difractar un cristal este sistema ofrece una estequiometría 1:1 (M:L). Por otra parte, los complejos del ligante PyTren-Piridinona muestra una estequiometría variable tanto en solución como en estado sólido, observándose como estequiometría mayoritaria la 1:1, M:L.

La evaluación de la capacidad antioxidante de los compuestos en estudio muestra la relación que existe entre función/estructura, dando como resultado que los ligandos en forma libre son más activos que los complejos, esto debido a que los grupos -OH en los complejos participan en la coordinación de los iones Cu^{2+} .

Los complejos de Cu^{2+} de los ligandos poliazamacrocíclicos se pueden utilizar como modelos de estudio de metaloproteínas, debido al tipo de estructura que presentan y el reconocimiento hacia histamina.

Referencias

- [1] López-Martínez, L. M., Polyhedron 2014, 79, 338–346.
- [2] López-Martínez, L. M., Inorganic Chemistry 2016, 55, 7564–7575.
- [3] López-Martínez, L. M., Polyhedron 2017, 127, 438–448.

SÍNTESIS DE DERIVADOS 1,3-OXAZOLIDIN-2-ONA ENANTIOMÉRICAMENTE PUROS Y CON ACTIVIDAD ANTIBACTERIAL A PARTIR DE L-ALANINA

Oswin Urías^a, Hisila Santacruz^a, Adrián Ochoa^b y Rocío Sugich^c

^aDepartamento de Investigación en Polímeros y Materiales, Universidad de Sonora, Hermosillo, Son. México; ^bCentro de Graduados e Investigación en Química, Instituto Tecnológico de Tijuana, Tijuana, BC. México; ^cDepartamento de Ciencias Químico Biológicas, Universidad de Sonora, Hermosillo, Son. México. oswin.urias@gmail.com

Introducción

Las oxazolidinonas son carbamatos cíclicos de 5 miembros que tienen gran importancia por su actividad antibacterial frente a microorganismos multidrogo resistentes. Esta familia de compuestos surgió en la década de los 80's y fue hasta el año 2000 que se aprobó su uso clínico por FDA¹, siendo Linezólida el primer antibiótico de esta familia, cuya estructura se observa en la figura 1.

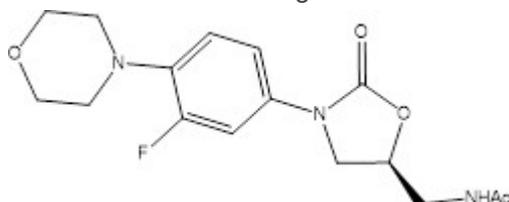


Figura 1. Estructura de Linezólida

Las oxazolidinonas han llamado fuertemente la atención por su mecanismo de acción novedoso y diferente al de otros antibióticos existentes. Estos compuestos actúan inhibiendo la síntesis de proteínas en una etapa temprana uniéndose al PTC ocasionando un cambio conformacional en el sitio activo del complejo 70S del ribosoma bacteriano². Ochoa y colaboradores reportaron en 2008³ la síntesis de derivados 1,3-oxazolidin-2-ona a partir de aminoácidos mediante una ruta de 7 reacciones. Posteriormente, Cordova y colaboradores en 2014⁴ reportaron la evaluación de la actividad antibacterial de derivados oxazolidinona siendo el derivado de L-alanina el que presenta la mayor actividad. Por lo anterior se planteó la síntesis de nuevos derivados 1,3-oxazolidin-2-ona con grupos bencilo nitrados.

Resultados y discusión

Siguiendo la síntesis reportada por Ochoa y col., se obtuvo el derivado oxazolidinona en forma enantioméricamente pura. Posteriormente, se realizó una reacción de hidrogenólisis para desproteger el grupo amino y finalmente, una reacción de sustitución para obtener el derivado nitrobencilo como se muestra en la figura 2.

La síntesis realizada implicó realizar 3 etapas de purificación por columna y un total de 9 etapas de reacción obteniéndose rendimientos del 34 al 96%.

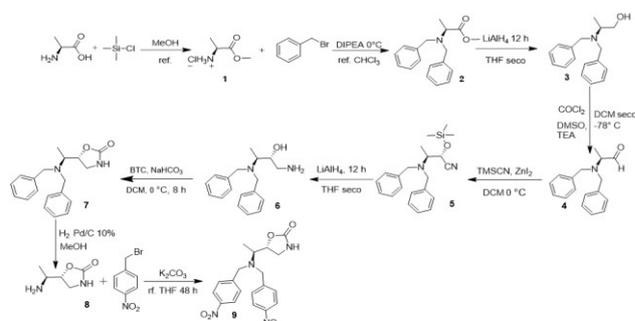


Figura 2. Ruta de síntesis realizada

En el espectro de RMN-¹H del derivado oxazolidinona con los grupos 4-nitrobencilo (Figura 3) se observan las señales correspondientes a los 4 hidrógenos del sistema aromático, en 6.05 ppm se observa la señal ancha del hidrógeno unido al nitrógeno del carbamato y el resto de señales características del compuesto.

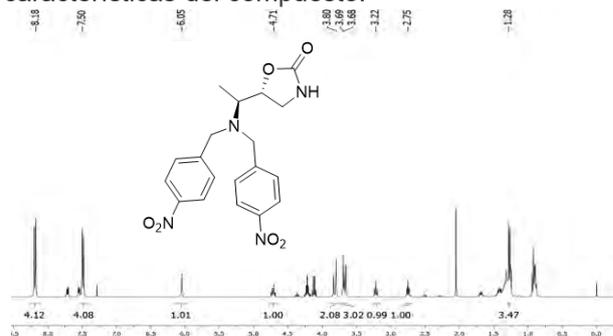


Figura 3. Espectro de RMN-¹H del compuesto 9

Conclusiones

Las condiciones experimentales utilizadas son adecuadas para la obtención de derivados 1,3-oxazolidin-2-ona con altos rendimientos y pureza enantiomérica.

Referencias

- Shaw K.J., Barbachyn M.R. Antimicrobial Therapeutics Reviews: Antibiotics That Target the Ribosome, **2011**, 1241.
- Wilson D.N., Schluenzen F., Harms J.M., Starosta A.L., Connell S.R., Fucini P. Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, **2008**, 105.
- Ochoa-Teran A., Rivero I.A. Arkivoc, **2008**, 330-343.
- Cordova-Guerrero J., Hernandez-Guevara E., Ramirez-Zatarain S., Nunez-Bautista M., Ochoa-Teran A., Muniz-Salazar R., Montes-Avila J., Lopez-Angulo G., Paniagua-Michel A., Torres G. International Journal of Molecular Sciences, **2014**, 15.

SÍNTESIS DE OXALAMIDAS TIPO PINZA DERIVADAS DEL ÁCIDO (+/-)-TRANS-N,N'-CICLOHEXAN-1,2-DIILDIOXALÁMICO

María Eugenia Ochoa,^a Rosa Santillan,^a Norberto Farfán,^b Francisco J. Martínez-Martínez,^c Itzia I. Padilla-Martínez^d y Efrén V. García-Báez^d

^aDepartamento de Química, CINVESTAV-IPN, México D.F. Apdo. Postal 14-740, 07000, México.

^bFacultad de Química, Departamento de Química Orgánica, Universidad Nacional Autónoma de México, 04510, México.

^cFacultad de Ciencias Químicas, Universidad de Colima km9 Carretera Colima-Coquimatlán, Colima 28400, México.

^dDepartamento de Química, Unidad Profesional Interdisciplinaria de Biotecnología del Instituto Politécnico Nacional, Av. Acueducto s.n. Barrio la Laguna Ticomán, CDMX 07340, México

rsantill@cinvestav.mx

Introducción

El reconocimiento molecular juega un papel fundamental en los procesos biológicos.¹ A la fecha se han diseñado un gran número de receptores artificiales para moléculas orgánicas neutra, quirales y aniónica; un tipo de receptores de gran interés son las pinzas moleculares.² Por otro lado, las oxalamidas son diamidas de ácido oxálico y pueden ser usadas como bloques con gran potencial para la formación de puentes de hidrógeno, además de presentar complementariedad. En estudios previos, el grupo de Padilla-Martínez y Martínez-Martínez ha descrito la síntesis de arquitecturas supramoleculares derivadas de oxalamatos y oxalamidas, en donde se demuestra el control conformacional de la cavidad oxalamato/oxalamida mediante el uso de sustituyentes.³

En el presente trabajo se describe la síntesis y caracterización en solución y en estado sólido de pinzas moleculares derivadas de ácido (+/-)-trans-N,N'-ciclohexan-1,2-diildioxalámico como espaciador y cumarinas sustituidas.

Para el compuesto **1** se obtuvieron cristales adecuados para difracción de Rayos-X por evaporación lenta de una mezcla acetona/hexano/acetonitrilo. El análisis de la estructura cristalina muestra que los dos fragmentos de cumarina que forman la pinza supramolecular se encuentran a 5.9 Å de distancia (Figura 2), sin presentarse interacciones supramoleculares entre ellas; esto permite suponer que es posible introducir moléculas o metales pequeños en estas cavidades.

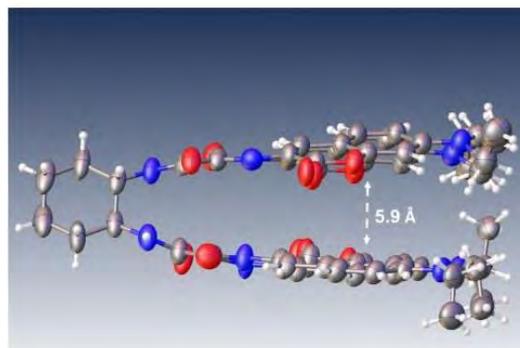
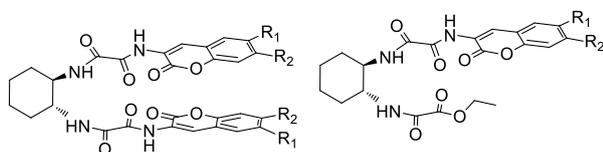


Figura 2. Estructura de Rayos-X de **1**



1: R₁ = H, R₂ = NEt₂
2: R₁ = Br, R₂ = H
3: R₁ = H, R₂ = H

4: R₁ = H, R₂ = NEt₂
5: R₁ = Br, R₂ = H
6: R₁ = H, R₂ = H

Figura 1. Bis-oxalamidas mono y disustituidas,

Resultados y discusión

La síntesis de los compuestos **1-6** se llevó a cabo empleando un equivalente del ácido (+/-)-trans-N,N'-ciclohexan-1,2-diildioxalámico, 2 eq. de la cumarina y 2 eq. de 2-etoxi-1-etoxicarbonil-1,2-dihidroquinolina (EEDQ) en una mezcla de THF/DMF obteniéndose una mezcla de mono- y bis-oxalamidas.

Conclusiones

Se sintetizaron nuevas pinzas moleculares mediante un procedimiento simple empleando EEDQ como agente acoplante. La estructura de Rayos-X muestra la presencia de puentes de hidrógeno direccionados.

Referencias

- 1.. Rebek J Jr., Science **1987**, 235, 1478.
- 2.. Klärner F.-G, Kahlert B. Acc. Chem. Res. **2003**, 36, 919-932.
3. González-González J. S., Martínez-Martínez F. J., Peraza Campos A. L., Rosales-Hoz Ma. de J., García-Báez E. V., Padilla-Martínez I., CrystEngComm, 2011, 13, 4748.

SÍNTESIS DE CO-CRISTALES ESTEROIDALES AUTOENSAMBLADOS MEDIANTE ENLACES DE HALÓGENO

Nancy Aguilar,^a Rafael Arcos,^b Margarita Romero,^a Rosa Santillan^c y Norberto Farfán.^a

^a.Facultad de Química, Departamento de Química Orgánica, Universidad Nacional Autónoma de México, 04510, Ciudad de México, México. E-mail: norberto.farfan@gmail.com. ^b. Departamento de Química de Radiaciones y Radioquímica, Instituto de Ciencias Nucleares, Universidad Nacional Autónoma de México, 04510, Ciudad de México, México.

^c. Departamento de Química, Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del IPN, Ciudad de México, Apdo. Postal 14-740, 07000, México.

Introducción

Los esteroides de origen natural son compuestos bioactivos que poseen múltiples aplicaciones en campos como la medicina, biología, síntesis orgánica y ciencia de materiales entre otros.¹⁻² En el presente proyecto se plantea la síntesis y evaluación en estado sólido de compuestos con arquitectura tipo rotor molecular. Aprovechando las cualidades estructurales de los esteroides y las propiedades que pueden aportar los rotadores funcionalizados, se busca generar materiales supramoleculares versátiles que puedan funcionar como sistemas anfidinámicos.

En este trabajo se describe la síntesis de co-cristales esteroideos con interacción de halógeno nitrógeno para la obtención de sistemas cristalinos con posible dinámica rotacional en estado sólido.

Resultados y discusión

Basados en las interacciones halógeno-nitrógeno descritas en la literatura se proponen tres familias de compuestos en donde se usará la cocrystalización vía enlace de halógeno-nitrógeno para la obtención de sistemas autoensamblados, los cuales serán sintetizados usando arquitecturas tipo rotor molecular con tres distintos rotadores, usando estradiol y mestranol como estatores.

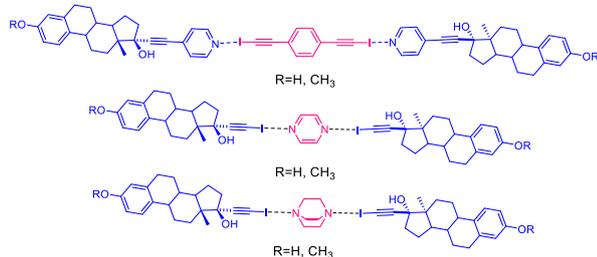


Figura 1. Estructuras de los co-cristales esteroideos objetivo

Los bloques de construcción fueron sintetizados mediante reacciones de acoplamiento de Sonogashira y reacciones de halogenación, mientras que la obtención de los cocrystalos fue mediante síntesis mecanoquímica asistida por disolvente.

Los bloques de construcción fueron caracterizados mediante técnicas espectroscópicas.

La formación de co cristales se monitoreo mediante difracción de rayos X de polvos. Se encontró que el rotor derivado de mestranol y DABCO fue obtenido, ya que al comparar los difractogramas de materias primas y producto, presentan patrones diferentes.

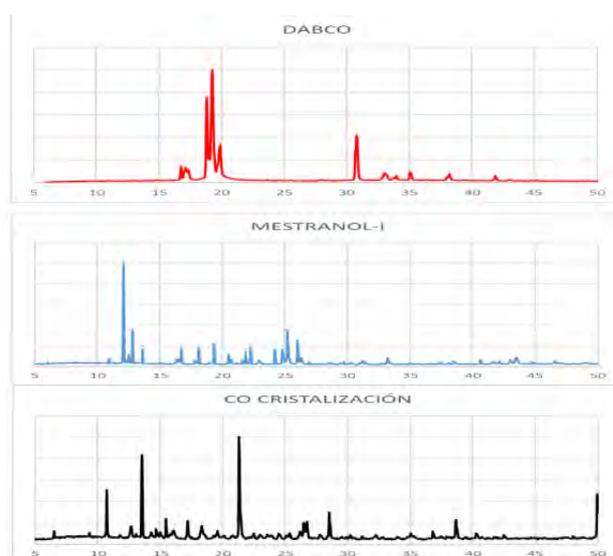


Figura 2. Difractogramas correspondientes a la obtención del rotor derivado de mestranol/DABCO.

Conclusiones

Se sintetizaron y caracterizaron rotores moleculares esteroideos autoensamblados vía enlace de halógeno, demostrándose así que las interacciones de halógeno son eficientes para poder dar lugar a sistemas anfidinámicos. Lo anterior es una alternativa a la unión de este tipo de sistemas que ya han sido descritos en la literatura.

Referencias

- Vogelsberg C S.; Garcia-Garibay, M.A. *Chem. Soc. Rev.*, **2012**, 41, 1892-1910.
- Rodriguez-Molina, B.; Farfan, N.; Romero, M.; Mendez-Stivalet, J.M.; Santillan, R.; Garcia-Garibay, M.A. *J. Am. Chem. Soc.* **2011**, 133, 7280-7283.
- Lucía González, N. lida Gimeno, Rosa María Tejedor, Victor Polo, M. Blanca Ros, Santiago Uriel, Jos Luis Serrano. *Chem. Mater.* **2013**, 25, 4503-4510.

RECEPTORES BIS-UREA PARA ANIONES Y SALES DE IMPORTANCIA BIOLÓGICA Y AMBIENTAL

Ramón Moreno-Corral^{1*}, Jancarlo Gomez-Vega¹, Enrique de la Re Vega,² Hisila Santacruz-Ortega,¹ Karen Ochoa Lara¹

¹Departamento de Investigación en Polímeros y Materiales, Universidad de Sonora. Rosales y Encinas s/n, Col. Centro C. P. 83000. Hermosillo, Sonora, México. ²Departamento de Investigaciones Científicas y Tecnológicas, Universidad de Sonora. Rosales y Encinas s/n, Col. Centro C. P. 83000. Hermosillo, Sonora, México.

*correo:ramon.moreno@polimeros.uson.mx

Introducción

El reconocimiento de pares iónicos por receptores heteroditópicos es de interés para la detección o cuantificación de analitos de importancia biológica o ambiental.¹ Un ejemplo de estos receptores son aquellos que incluyen éteres corona y grupos urea o tiourea, para el reconocimiento simultáneo catión-anión.² Por otro lado, si en estos sistemas se incorporan en su estructura unidades fluoróforas, esto los convierte en potenciales candidatos para sensar huéspedes diversos. Por tal razón, nuestro grupo de investigación se ha enfocado al diseño de heteroditópicos acíclicos, los cuales se obtienen por rutas sintéticas simples y con buenos rendimientos, y que presentan buena afinidad por diversos pares iónicos.³ En este trabajo se presenta la síntesis y caracterización de los receptores de la Figura 1. Estos fueron evaluados como monotópicos de aniones, mediante fluorescencia por la técnica de microplaca, en DMSO y 90:10 DMSO:Agua.

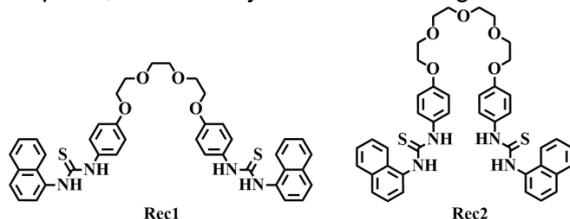


Figura 1. Estructuras químicas de los receptores.

Resultados y discusión

Los receptores fueron obtenidos en buenos rendimientos y caracterizados por técnicas convencionales. También se realizaron estudios de reconocimiento molecular con varios huéspedes por la técnica de fluorescencia en microplaca (Tabla 1). Tabla 1. Constantes de asociación (K) de algunos sistemas estudiados en DMSO y DMSO:Agua 95:5 v/v, a 298 K.

Huésped	K (M^{-1}) ^a	
	Rec1	Rec2
FosTBA ^b	6769	3978
NaCH ₃ COO ^c	15393	10265
Na ₂ SO ₄ ^c	14956	10950
Na ₂ HPO ₄ ^c	14270	11587
NaF ^c	15219	13391

^a.- Errores asociados $\leq 10\%$. ^b.- DMSO. ^c.- DMSO:Agua 95:5 v/v.

Destaca la desprotonación de las tioureas de ambos receptores a altas concentraciones de fluoruro y acetato, lo cual imposibilitó la determinación de K . Ambos receptores mostraron mejores afinidades y respuestas espectrales con las sales de aniones básicos. A partir de la respuesta en fluorescencia de **Rec1** y **Rec2**, se obtuvieron los límites de cuantificación y de detección para las sales NaCH₃COO, Na₂SO₄, Na₂HPO₄ y NaF (ver Figura 2), siendo esta última cuantificable en concentraciones similares a las establecidas en las normas oficiales mexicanas para el agua potable.

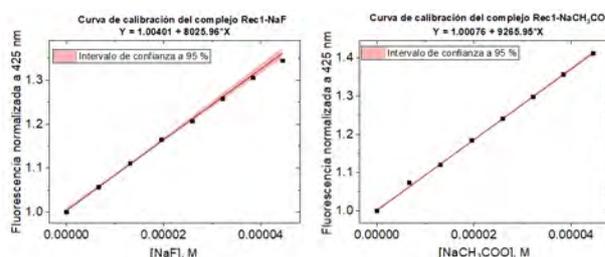


Figura 2. Curvas de calibración ponderadas de **Rec1** y las sales NaF y NaCH₃COO. Las sombras rojas representan el intervalo de confianza al 95%. N=8.

Conclusiones

Se sintetizaron dos receptores capaces de reconocer diversos aniones y sales. El incremento de los valores de K para distintas sales de sodio en DMSO:Agua (95:5 v/v) sugiere que los sistemas pueden funcionar como heteroditópicos. En base a los resultados obtenidos, la cuantificación del anión fluoruro empleando los compuestos **Rec1** y **Rec2** por la técnica de fluorescencia en microplaca es viable. Dicha cuantificación podría implementarse tanto en alimentos como en matrices acuosas. Sin embargo, el protocolo para la cuantificación de fluoruro aún debe ser perfeccionado y debe considerar el tipo de muestra.

Referencias

1. McConnell & Beer, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2012**, 51, 5052-5061.
2. Karbarz & Romanski, *Inorg. chem.*, **2016**, 55, 3616-3623.
3. Gómez-Vega, et al, **2018**, sometido.

SÍNTESIS DE ESPIROBORATOS Y EVALUACIÓN DE SUS PROPIEDADES FLUORESCENTES

Xochilt Ceron Romero^a, Rosa Ángeles Vázquez García^b, Heraclio López Ruiz^a y Susana Rojas Lima^a
^aÁrea Académica de Química, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, ^b Centro de Investigaciones en Materiales y Metalurgia, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo Mineral de la Reforma, Hidalgo, México. C.P. 42184.
lima@uaeh.edu.mx

Introducción

Los espiroboratos son complejos de boro con dos sistemas cíclicos orientados ortogonalmente uno de otro.¹ Estos compuestos se han utilizado como electrolitos no tóxicos en baterías de litio;² han tenido gran aplicación como agentes protectores de madera contra hongos y termitas.² Algunos espiroboratos naturales han presentado actividad antibiótica tales como la aplasmomicina A³ (Figura 1). También, se han utilizado en síntesis orgánica como agentes reductores y catalizadores.⁴ Así como bloques de construcción en química supramolecular.⁵ Los espiroboratos fluorescentes son utilizados en el reconocimiento de iones, colorantes para láser y como materiales semiconductores debido a su alta estabilidad y a sus fuertes propiedades π -aceptoras.¹

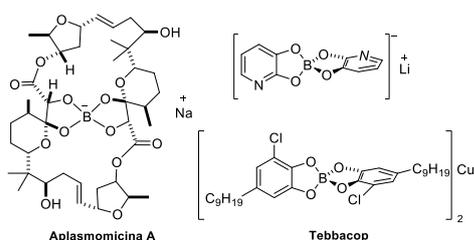


Figura 1

Debido al interés que tenemos en el grupo de investigación por llevar a cabo la preparación de compuestos estables con propiedades fluorescentes, decidimos funcionalizar a los 2-arilbenzoxazoles a través de la formación de sus espiroboratos.

Resultados y discusión

La preparación de los espiroboratos **4** se llevó a cabo utilizando 1 eq. del 2-arilbenzoxazol⁶ (**1**), 1 eq de catecol (**2**) y 1.1 eq de ácido bórico en CH_2Cl_2 bajo irradiación con microondas a 120 W y 150°C por 30 min. Por otro lado, la preparación del espiroborato **5**, se llevó a cabo utilizando ácido salicílico (**3**) bajo las mismas condiciones de reacción (Figura 2). Los productos obtenidos fueron purificados por cristalización fraccionada utilizando CHCl_3 /Hexano con rendimientos del 50-88%.

Los compuestos fueron caracterizados por RMN de ^1H , ^{13}C y ^{11}B , UV-Vis, fluorescencia en solución y estado sólido y mediante difracción de rayos-X de monocristal en donde se observan interacciones intermoleculares por puente de hidrógeno y

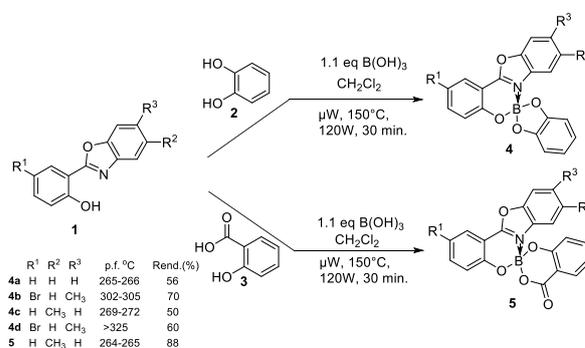


Figura 2

apilamientos π , los ángulos interplanares de cada especie confirman la orientación ortogonal de las moléculas. (Figura 3). Los compuestos presentaron rendimientos cuánticos de 0.0217 al 0.19 en CHCl_3 .

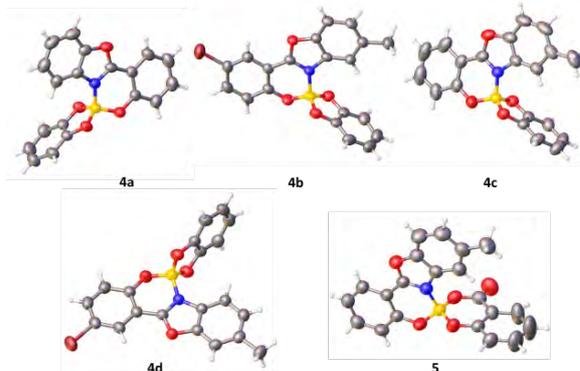


Figura 3

Conclusiones

En este trabajo se desarrolló un método eficiente para la preparación de espiroboratos, los cuales presentaron interacciones intermoleculares en estado sólido, que aunados a los valores del gap óptico los hace candidatos para la generación de semiconductores orgánicos.

Referencias

1. Kumbhar H. S., Deshpande S. S., Shankarling G. S. *Dyes and pigments*, **2016**, 127, 161.
2. Vogels C. M., Westcott S. A. *Chem. Soc. Rev.*, **2011**, 40, 1446
3. Okazaki T., Kitahara T., Okami Y., *J. Antibiot.*, **1975**, 28, 176
4. Stepanenko V., de Jesus M., García C., Barnes C. L., Ortiz-Marciales M., *Tetrahedron Lett.*, **2012**, 53, 910.
5. Danjo H., Kidena Y., Kawahata M., Sato H., Katagiri K., Miyazawa T., Yamaguchi, K. *Org. Lett.* **2015**, 17, 2466.
6. López-Ruiz H., Briseño-Ortega H., Rojas-Lima S., Santillán R., Farfán N., *Tetrahedron Lett.*, **2011**, 52, 4308.

QUIMIODETECCIÓN BASADA EN EL ESTUDIO DE INTERACCIONES SUPRAMOLECULARES PARA LA DISCRIMINACIÓN FLUORESCENTE DE ANIONES A TRAVÉS DE UN SENSOR MOLECULAR DE ZN(II)

Misael Olivera Domínguez,^a Cinthia Laura Hernández Juárez,^a Viridiana Velásquez Castillo,^b Jesús Valdez Martínez,^{a,b} Alejandro Dorazco González.

^aCentro Conjunto de Investigación en Química Sustentable UAEMéx-UNAM, ^bInstituto de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, Carretera Toluca-Atacomulco Km 14.5, C. P. 50200, Toluca, Estado de México, México.

misaolidom@gmail.com

Introducción

El diseño de un quimiosensor/receptor potente y selectivo para aniones con importancia biológica y ambiental en agua es un tema pendiente en química supramolecular debido a las altas energías de hidratación de los aniones y a que las moléculas de agua compiten por los sitios de unión.^[1]

La combinación de centros metálicos con alta afinidad a especies aniónicas y ligandos quelatos fluorescentes estables en medios acuosos ha sido una estrategia exitosa en los últimos años.^[2]

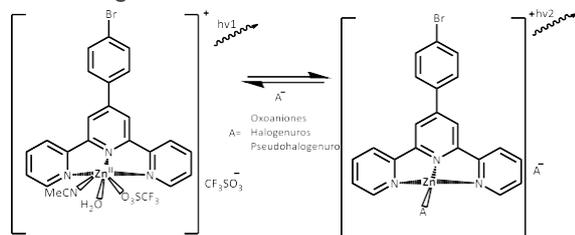


Figura 1

El concepto de detección está basado en que la coordinación del analito al sensor de Zinc (II) generara un cambio en su absorbancia y emisión del quimiosensor, lo cuál puede ser monitoreado fácilmente en tiempo real como función de la concentración del anión.^[3] (Figura 1)

El presente trabajo se enfocó en la síntesis de un nuevo complejo fluorescente de Zn(II) y su estudio como sensor/receptor óptico para una serie extensa de aniones (F⁻, Cl⁻, Br⁻, I⁻, CN⁻, H₂PO₄⁻, NO₃⁻, H₂AsO₄⁻, H₂AsO₃⁻, OH⁻ y CH₃CO₂⁻) en agua neutra.

Resultados y discusión

La estructura cristalina de **Zn-Terpy** muestra un complejo mononuclear con una geometría octaédrica distorsionada del tipo [Zn(N[^]N[^]N[^])(N,O,O)], los complejos están ordenados en cadenas a través de múltiples enlaces de hidrógeno del tipo Zn-OH₂ ... O_{triflato}. (Figura 2)

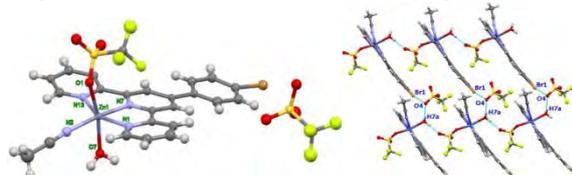


Figura 2

Este producto se analizó por RMN ¹H para asegurar se trataba del complejo y así poder continuar con la síntesis de intercambio aniónico.(Figura 3)

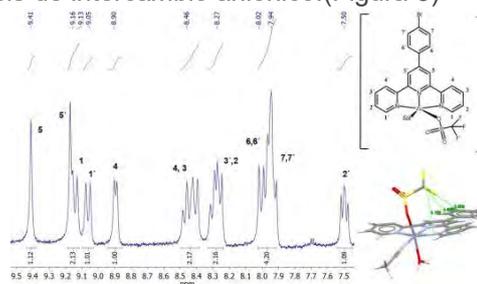


Figura 3

La adición de sales de sodio de yoduro, bromuro y cianuro a soluciones acuosas de **Zn-Terpy** generan una rápida respuesta analítica (Figura 4), específicamente una fuerte extinción de su emisión fluorescente.



Figura 4

Conclusiones

El cambio óptico en su emisión permite la detección de cianuro en concentraciones micromolares con selectividad sobre oxoániones, cloruro y fluoruro. La afinidad a I⁻, Br⁻ y CN⁻ fueron calculadas en los intervalos de $K_{1:1} = 7.50 \times 10^5 - 3.20 \times 10^5$ y $K_{1:2} = 1.60 \times 10^3 - 8.30 \times 10^2 \text{ M}^{-1}$ por la coordinación consecutiva de dos aniones al centro metálico a través de titulaciones fluorimétricas y espectrofotométricas utilizando un modelo 1:2 (receptor/anión).

Referencias

- [1] Dorazco-González A., Martínez-Vargas, S., Hernández-Ortega, S. & Valdés-Martínez, J. (2013). *CrystEngComm*. 15(30), p. 5961.
- [2] Ahmed, S., Burgess, J., Fawcett, J., Parsons, S., Russell, D. & Laurie, S. (2000). *Polyhedron*. 19(2), p. 129–135.
- [3] Antonisse, M. & Reinhoudt, D. (1998). *Chem. Commun.*, p. 443–448.

SÍNTESIS DE COMPLEJOS DE NITROSIL RUTENIO, CON LIGANTES DEL TIPO 2,2':6',2''-TERPIRIDINA Y 2,2'-BIPYRIDINA, PARA LA FOTOLIBERACIÓN DE NITRSILO

Alejandro Enriquez^a, Pascal G. Lacroix^b, Isabelle Malfant^b, Isabelle Sasaki^b, Margarita Romero^a y Norberto Farfán^a

^aFacultad de Química, Departamento de Química Orgánica, Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad Universitaria, Ciudad de México No. 04510, México. ^bLaboratoire de Chimie de Coordination du CNRS, 205 route de Narbonne, F-31077 Toulouse, France. enriquez_ale@hotmail.com

Introducción

En las últimas décadas se ha descubierto que el óxido nítrico (NO) tiene un papel importante en diversos procesos fisiológicos y patológicos, lo que ha estimulado la búsqueda de donadores eficientes de NO; entre los que destacan los compuestos derivados de nitrosil rutenio.¹ Los derivados de nitrosil rutenio son candidatos prometedores debido a que, suelen ser estables en medios acuosos, suelen tener bajas toxicidades y solo liberan NO al ser expuestos a la luz.²

En este trabajo se presenta el diseño, síntesis y estudio fotofísico de diferentes complejos de nitrosil rutenio (Figura 1), capaces de liberar NO al ser expuestos a la luz; además se explora la posibilidad de emplear la absorción de dos fotones como medio para liberar NO en el intervalo de 700 a 1300 nm (ventana fototerapéutica).

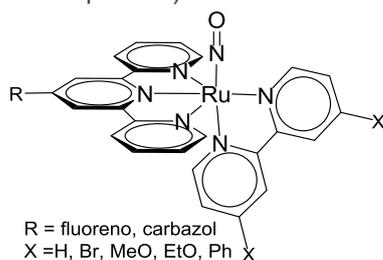


Figura 1

Resultados y discusión

Se sintetizaron 9 diferentes complejos de nitrosil rutenio, de los cuales se ha evaluado la eficiencia de fotoliberación de NO para 4 de ellos, los cuales se encuentran en el intervalo del 1% al 6%.

Se evaluó la absorción de dos fotones mediante la técnica de z-scan encontrando para el derivado del fluoreno un valor de 108 GM y para el del carbazol un valor de 159 GM (Figura 2).

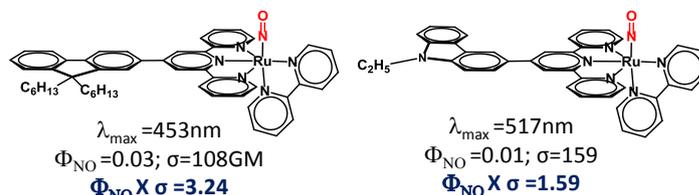


Figura 2

Conclusiones

Se han sintetizado diferentes complejos de nitrosil rutenio, los cuales serán evaluados para determinar su eficiencia en fotoliberación de NO así como su absorción de dos fotones.

Referencias

- Riccio, D.A.; Schoenfish, M.H., *Chem. Soc. Rev.*, **2012**, 3731-3758
- Fry, N.L., Mascharak, P.K.; *Acc. Chem. Res.*, **2011**, 289-298
- Enriquez-Cabrera, A.; Sasaki, I.; Bukhanko, V.; Tassé, M.; Mallet-Ladeira, S.; Lacroix, P.G.; Barba-Barba, R.M.; Ramos-Ortiz, G.; Farfán, N.; Voitenko, Z. and Malfant, I.; *Eur. J. Inorg. Chem.* **2017**, 1446-1456
- Enriquez-Cabrera, A.; Lacroix, P.G.; Sasaki, I.; Mallet-Ladeira, S.; Farfán, N.; Barba-Barba, R.M.; Ramos-Ortiz, G. and Malfant, I.; *Eur. J. Inorg. Chem.*; **2018**, 531-543

INCORPORACIÓN DE CLOTRIMAZOL EN SISTEMAS POLIMÉRICOS SUBMICRÓNICOS DE ACETATO FTALATO DE CELULOSA CON POTENCIAL APLICACIÓN VAGINAL

Elizabeth Piñón Segundo^a y María del Rocío Lara Sánchez^a

^a Laboratorio de Sistemas Farmacéuticos de Liberación Modificada, L-13 UIM, Facultad de Estudios Superiores Cuautitlán, Universidad Nacional Autónoma de México, México. epinons@comunidad.unam.mx

Introducción

La FDA define a los microbicidas como productos farmacéuticos intravaginales que reducen el riesgo de adquirir enfermedades de transmisión sexual (ETS)¹. Dentro de los microbicidas, se ha encontrado que el Acetato Ftalato de Celulosa (CAP, por sus siglas en inglés), es eficiente en la prevención del contacto entre algunos virus y su célula blanco. En este proyecto se pretende aplicar las ventajas que ofrece la nanotecnología para generar un sistema farmacéutico novedoso que ayude a mitigar problemas de salud pública, como la reincidencia de las infecciones vaginales micóticas. Considerando que la alteración de la integridad del epitelio vaginal provocada por micosis vaginales recurrentes aumenta la susceptibilidad de las mujeres frente a ETS, incluyendo el VIH², se diseñó un sistema submicrónico para la liberación controlada de un principio activo antimicótico (Clotrimazol - CLT) que aumente la eficacia del tratamiento de la vaginitis y que permita preservar saludable el epitelio vaginal. Al mismo tiempo, las propiedades microbicidas de dicho sistema terapéutico podrán reducir sustancialmente el riesgo de adquirir o transmitir infecciones causadas por virus.

Resultados y discusión

Uno de los objetivos de este trabajo fue obtener nanopartículas poliméricas (NPs) mediante el método de emulsificación – difusión modificado (MEDM), es decir, sin agregar agua libre a la emulsión formada y evaporando el solvente a presión reducida inmediatamente después de la emulsificación para obtener suspensiones más concentradas. Se prepararon cuatro lotes con CAP (400 mg) y con diferente carga de principio activo cada uno: 50, 100, 150 y 200 mg de CLT por MEDM. En todos los casos se obtuvieron partículas con tamaño promedio por debajo de los 400 nm; sin embargo, en las suspensiones se observó la presencia de sedimento. Después observar las partículas por microscopía electrónica de barrido y analizar el mecanismo de formación propuesto para el método de emulsificación – difusión tradicional (MEDT)³ se puede afirmar que, con la modificación

del método, es decir, evitando la difusión del solvente hacia el agua libre, el proceso de formación de las NPs es incompleto y éstas forman conglomerados.

Por lo anterior, se decidió elaborar las NPs por el MEDT. Se prepararon por triplicado tres lotes: 50 (LA), 100 (LB) y 150 (LC) mg de CLT; y un lote de CAP (LCAP). Las dispersiones obtenidas en los tamaños de partícula, mostraron un Pdl por debajo de 0.14; con respecto a los valores de Pdl obtenidos para el MEDM, la uniformidad de tamaño se mejoró al utilizar el MEDT. En las micrografías de los lotes LA1, LB1, LC1 y LCAP se observó que la morfología de las NPs es esférica y uniforme para las diferentes cargas de CLT; además se descarta la existencia de cristales de CLT, según la caracterización por calorimetría diferencial de barrido. Se realizaron estudios *in vitro* para evaluar los perfiles de liberación del CLT incluido en las NPs de cada lote y se siguió la liberación por 4 días. Los datos obtenidos se trataron con el modelo semiempírico Korsmeyer-Peppas⁴ y de acuerdo con los exponentes difusionales obtenidos para todos los lotes el mecanismo de difusión es anómalo. Finalmente se determinó que los perfiles de liberación se ajustan al modelo de Weibull⁵.

Conclusiones

Por medio del MEDT se obtuvieron NPs de CAP con tres diferentes cargas de CLT, presentando tamaños promedio de 235-290 nm. Se evaluó el perfil de liberación *in vitro* del CLT incluido en las NPs, los datos obtenidos se ajustaron al modelo de Weibull, resultando en un sistema terapéutico cuya liberación es mantenida durante cuatro días.

Referencias

1. FDA-CDER. Vaginal Microbicidas: Development for the prevention of HIV infection. Guidance for Industry, 2012.
2. Thurman, A. R., y G. F. Doncel. American Journal of Reproductive Immunology 65, nº 2 (2011): 89-98.
3. Quintanar-Guerrero, D., Allémann, E., Fessi, H. & Doelker, E., 1998. Drug Development and Industrial Pharmacy, 24(12), pp. 1113-1128.
4. Costa, P., y J.M. Sousa. European Journal of Pharmaceutical Sciences 13 (2001): 123-133.
5. Dash, S., P. Narasimha, L. Nath, y P. Chowdhury. Acta Poloniae Pharmaceutica - Drug Research 67 (2010): 217-223.

SÍNTESIS DE NANOCÁPSULAS POR AUTOEMULSIFICACIÓN *IN SITU* PARA LA ADMINISTRACIÓN DE UN ANTIEPILÉPTICO

Giovana Tapia Torres y Néstor Mendoza Muñoz

Facultad de Ciencias Químicas, Universidad de Colima, Colima, México. nmendoza0@ucol.mx

Introducción

El desafío más grande de los tratamientos que actúan en el Sistema Nervioso Central (SNC) es lograr atravesar la Barrera Hemato Encefálica (BHE).¹ Cuando un medicamento es administrado por vía intranasal, se transporta hasta el cerebro a través de los nervios olfatorio y trigeminal, sin pasar por la BHE.^{1,2}

Los sistemas farmacéuticos más populares para esta vía son los nanovehículos, uno de ellos son las nanocápsulas poliméricas de acuerdo a su composición pueden proteger los activos, controlar la liberación, mejorar la absorción y permanecer en el sitio más tiempo,^{1,2} sin embargo su principal los métodos de preparación requieren de pasos adicionales que afectan las propiedades del sistema.¹⁻³

Llera-Rojas⁴ logró obtener por un nuevo método nanocápsulas basándose en un sistema autoemulsificable por vía oral. El objetivo de esta investigación es sintetizar nanocápsulas en un ambiente nasal simulado con el fin de mejorar las propiedades terapéuticas de un antiepileptico.

Resultados y discusión

Se seleccionaron los componentes afines con el fármaco anticonvulsivo Fenitoína; Aceite: Monooleato de glicerilo (tipo 40), Surfactante: Gliceridos capricos/ caprílico PEG-8 y Cosurfactante: Éter monoetilico de dietilenglicol y Etanol. Se realizaron 96 formulaciones con dichos componentes en distintas proporciones y se evaluó su capacidad para autoemulsificarse en una Solución Nasal Simulada (SNS), se calculó el porcentaje de los componentes en cada una de las formulaciones y la información se graficó en diagramas ternarios.

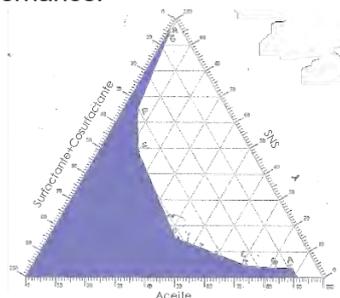


Figura 1. Diagrama ternario para la formulación con mayor área de microemulsión.

La figura 1 muestra el diagrama de la formulación con mayor área de microemulsión y que demostró ser estable. Esta emulsión tipo agua en aceite fue adicionada con el polímero Copolímero de anhídrido maleico y fue capaz de formar nanopartículas; el tamaño más pequeño 265 ± 5 nm se obtuvo a una concentración de 30 mg/ml de polímero.

La formulación optimizada fue adicionada con Fenitoína, se comparó el tamaño de partícula (cuadro I) y la estabilidad.

Cuadro I. Tamaños de partícula de sistemas autoemulsificables

Sistemas autoemulsificables con Fenitoína			
Concentración de Fenitoína (mg/ml)	10	20	Blanco
Tamaño de partícula (nm)	342 ± 3	255 ± 4	289 ± 3

El sistema con 20 mg/ml de fenitoína fue analizado por Microscopía Electrónica de Barrido (MEB), en la figura 2 se observa la morfología esférica con un tamaño de aproximadamente 250 nm.



Figura 2. Micrografías de nanocápsulas de fenitoína obtenidas por MEB a 30000 aumentos.

Conclusiones

La realización del diseño experimental permitió encontrar una fórmula óptima, estable y afín al fármaco seleccionado. Los resultados obtenidos demuestran la formación de nanocápsulas de Fenitoína al entrar en contacto con una SNS lo que sugiere su posible aplicación como sistema de liberación de fármaco por administración intranasal, con lo cual se aumentaría la velocidad absorción, incrementaría la cantidad de fármaco en la diana y disminuiría las dosis así como los efectos secundarios causados por las mismas.

Referencias

- Feng Y., He H., Li F., Lu Y., Qi J., Wu W., Drug Discov Today, **2018**, 1-10.
- Warnked Z. N., Smith H., Watts A. B., Weitman S., J Drug Deliv Sci Tec **35**, **2016**, 213-222.
- Quintanar D., Allémann E., Fessi H., Doelker E., Drug Dev Ind Pharm **24**, **1998**, 1113-1128.
- Llera-Rojas V. G., Real A., Mendoza N., Drug Dev Ind Pharm **43**, **2017**, 925-931.

LIBERACIÓN TRANSDÉRMICA PROMOVIDA POR MICROAGUJAS DE KETOROLACO TROMETAMINA FORMULADO EN LIPOSOMAS ELÁSTICOS

Guadalupe Nava^a, Cynthia Rodríguez^a, y Adriana Ganem^a

^a Laboratorio de Investigación y Posgrado en Tecnología Farmacéutica L-322, Facultad de Estudios Superiores Cuautitlán UNAM, Estado de México, México. gpearz@hotmail.com

Introducción

El ketorolaco trometamina (KT) es un fármaco, con una potente actividad analgésica similar a los opioides. La biodisponibilidad oral reportada del KT es de 90%, con un tiempo de vida media de 4 a 6 horas, por lo que se requiere una administración frecuente para mantener niveles terapéuticos. El uso prolongado de este fármaco puede resultar en ulceración gastrointestinal y falla renal aguda. Por lo que se hace necesaria una alternativa para la administración de este fármaco. La liberación transdérmica es una ruta atractiva de administración de fármacos, sin embargo, por las características fisicoquímicas del KT, penetra escasamente a través de la piel¹, se ha sugerido el uso de nanoacarreadores en conjunto con un promotor físico como las microagujas para favorecer el transporte de moléculas a través de la piel². Por lo que el objetivo de este trabajo fue preparar liposomas elásticos conteniendo KT y estudiar su permeación a través de piel tratada con microagujas.

Resultados y discusión

Los liposomas elásticos se prepararon a base de fosfatidilcolina, Tween® 80 y KT, por el método de hidratación de película. Los LE obtenidos tienen un tamaño de 85 nm con un índice de polidispersión de 0.39, un potencial zeta de -16.9 ± 1.57 mV y una eficiencia de encapsulamiento de 54.85 ± 3.71 %. El estudio de liberación del fármaco a partir de los liposomas se realizó utilizando una membrana de diálisis montada en una celda de difusión tipo Franz, el perfil de liberación del KT a partir de los LE con respecto al tiempo se muestra en la figura 1. La liberación del KT a partir de los liposomas sigue una cinética de primer orden. Así mismo esto se ajustan al modelo de Higuchi, lo cual sugiere que el mecanismo dominante de la liberación es la difusión.

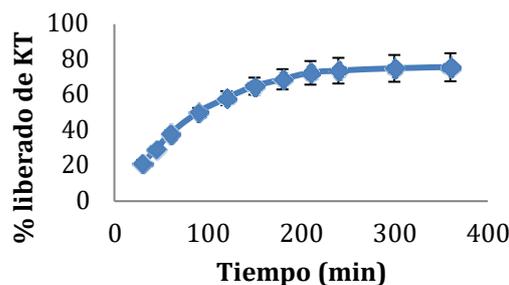


Figura 1. Perfil de liberación del KT a partir de los LE

El fármaco incluido en los LE no fue capaz de permear a través de la piel de oreja de cerdo. Sin embargo, el paso del KT incluido en LE se vio favorecido con el pretratamiento con microagujas (500 μ m). En la figura 2, se puede observar que la permeación muestra un comportamiento bifásico.

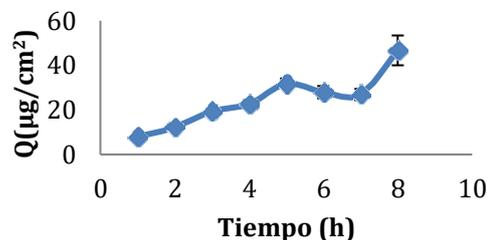


Figura 2. Permeación del KT en LE a través de piel completa pre-tratada con microagujas

Conclusiones

La inclusión de KT en liposomas elásticos no favoreció la permeación del mismo a través de la piel. El pretratamiento de la piel con un arreglo de microagujas con longitud de 500 μ m, permitió el paso de la suspensión de LE conteniendo KT, permitiendo la formación de un depósito a partir del cual el fármaco puede seguir difundiendo a través de la piel.

Referencias

1. Liu K.S., Hsieh P.W., Aljuffali I.A., Lin Y.K., Chang S.H., Wang J.J., Fang J.Y., *J. Pharm. Sci.* **2014**, 103, 974
2. Dragicevic N., Maibach H., *Adv. Drug Deliv. Rev.* **2018**, 127, 58

SEPARACIÓN DE HIDROCARBUROS EMPLEANDO SILICATOS MICROPOROSOS

María José Emparan Legaspi, Jorge González González, Roberto Muñiz Valencia e Ismael Alejandro Aguayo Villareal

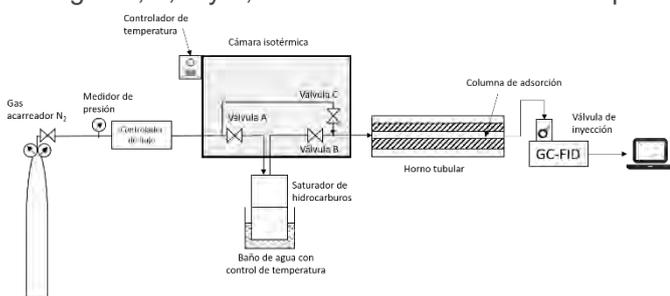
Facultad de Ciencias Químicas, Universidad de Colima, Coquimatlán, Colima, México;
mariajose_emparan@uacol.mx

Introducción

Dentro de la industria del petróleo existen mezclas de hidrocarburos que son difíciles de separar por métodos tradicionales como destilación. Una de las alternativas que se ha empleado en los últimos años es la adsorción. Dentro de la industria, se ha empleado el carbón activado como material de separación. Sin embargo, a pesar de que es económico, puede presentar riesgo de incendio y su capacidad de regeneración es baja¹. Se han empleado otro tipo de materiales de adsorción como sílices porosas, zeolitas o MOF's². En este trabajo se emplea una sílice microporosa como material de separación de mezclas binarias de hidrocarburos.

Resultados y discusión

Se sintetizaron silicatos microporosos mediante técnicas hidrotermales. Se diseñó y construyó un sistema (Figura 1) para evaluar la capacidad y selectividad de adsorción de mezclas de hidrocarburos (benceno/ciclohexano, tolueno/heptano y tolueno/iso-octano). Los materiales se evaluaron como adsorbentes. En las Figuras 2, 3 y 4, se muestran las curvas de ruptura



de los experimentos realizados a 50°C.

Figura 1

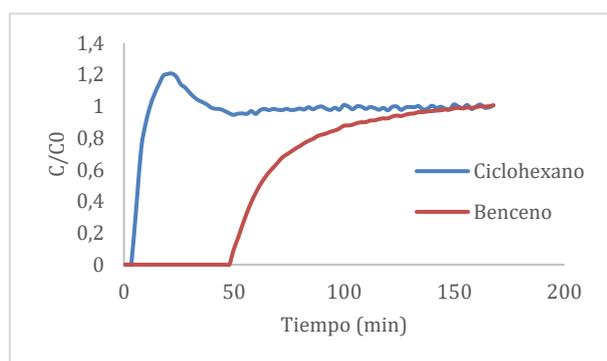


Figura 2

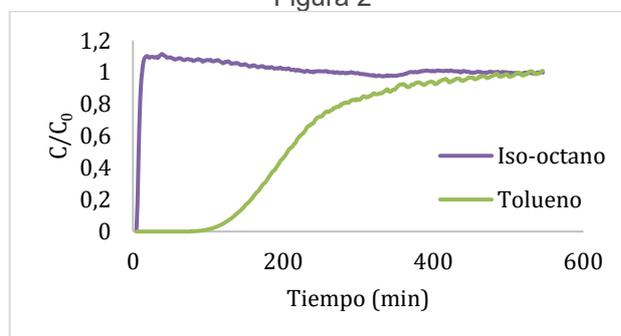


Figura 3

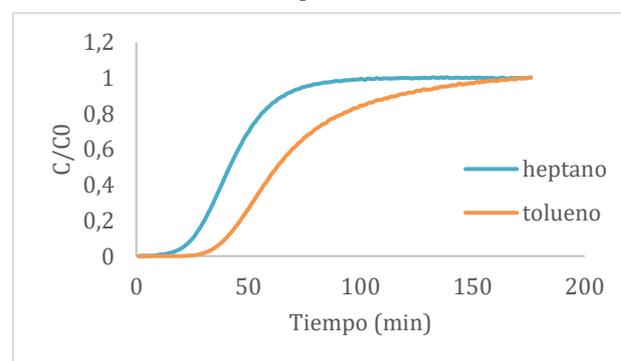


Figura 4

Conclusión

El material que se probó tiene la capacidad de separar compuestos con características similares, sobre todo con las mezclas ciclohexano/benceno e iso-octano/tolueno. Las selectividades en cada caso es de 19.4 hacia el benceno, 25.0 para tolueno en la mezcla iso-octano/ tolueno y 1.3 para tolueno en la mezcla heptano/tolueno. Las capacidades de adsorción del material para cada uno de los compuestos nos indican selectividad hacia uno de los compuestos, lo cual lo hace un candidato como material de separación para este tipo de mezclas.

Referencias

- Hu, Q., Li, J., Hao, Z. P., Li, L. D., Qiao, S. Z. *Journal of Hazardous Materials*. **2009**, 281.
- Kosuge, K., Kubo, S., Kikukawa, N., Takemori, M. *Langmuir*. **2007**. 3095.

CÚMULOS DE ÓXIDO DE MAGNESIO COMO CANDIDATOS PARA EL ALMACENAJE DE HIDRÓGENO MOLECULAR: ESTABILIDAD ENERGÉTICA E INTERACCIÓN CÚMULO-H₂

Juan Pablo Mojica-Sánchez^a, Tania Isabel Zarate-López^a y Zeferino Gómez-Sandoval^a

^aFacultad de Ciencias Químicas, Universidad de Colima, Carretera Colima-Coquimatlán km. 9, Coquimatlán, Colima Col. C.P. 28400, México. *mojica_sanchez@ucol.mx*

Introducción

El fenómeno de adsorción relacionado con el almacenamiento de hidrógeno puede clasificarse en dos categorías: fisiorción (materiales de carbono, estructuras metalo-orgánicas) y quimisorción (hidruros, cúmulos metálicos).¹

El desarrollo y aplicación de materiales de metales alcalinotérreos ha probado ser útil en el almacenamiento de hidrógeno.² Shinde y Tayade en 2014³ basándose en cálculos DFT analizaron la capacidad de almacenamiento de hidrógeno de cúmulos de óxido de berilio (BeO)_n (n=2-8). Demostraron que la polaridad del enlace Be-O es altamente responsable de su capacidad de adsorción y que la densidad gravimétrica del H₂ adsorbido en los cúmulos de BeO cumple con el límite mínimo del 7,5 % en peso, recomendado para aplicaciones prácticas.

En ese sentido en el presente trabajo se realizó un estudio de las propiedades estructurales y de almacenamiento de hidrógeno de cúmulos de óxido de magnesio (MgO)_n, n=1-10. Las estructuras de mínima energía de los cúmulos de óxidos de magnesio fueron seleccionadas a partir de algoritmos genéticos y las estructuras con moléculas de hidrógeno adsorbidas fueron tomadas a partir de trayectorias de dinámica molecular de Born-Oppenheimer considerando una temperatura de 300 K. Las estructuras fueron sujetas a optimizaciones locales. Una vez establecidos los puntos estacionarios de menor energía para cada sistema, estas se utilizaron para calcular las propiedades electrónicas y de adsorción de hidrógeno.

Resultados y discusión

Las geometrías de los cúmulos de óxido de magnesio, (MgO)_n, n=1-10 obtenidas por algoritmos genéticos indican que en donde se da la transición de un cúmulo 2D a uno 3D es en el sistema (MgO)₆, este sistema posee una estructura de dos anillos hexagonales isotoxiales intercalados (D_{3d}). El estado fundamental del siguiente cúmulo bajo estudio presentó una estructura tipo caja de grupo puntual C_{3v}, este sistema fue en el que se encontró la mayor

energía de adsorción de H₂ (Tabla 1). En el que la energía obtenida corresponde a una energía de fisiorción.

Tabla 1. Número de moléculas de H₂ adsorbidas, densidad gravimétrica (wt%) y energía de adsorción por molécula de H₂.

n	NH ₂	wt%	E _a
1	10	33.340	0.077
2	17	29.831	0.099
3	14	18.923	0.103
4	15	15.793	0.089
5	16	13.796	0.092
6	17	12.412	0.109
7	16	10.259	0.125
8	16	9.093	0.120
9	18	9.093	0.112
10	18	8.259	0.103

Una de las cosas que contribuye con la capacidad de adsorción de hidrógeno es la polaridad del enlace Mg-O y la transferencia de carga de los átomos de oxígeno, lo que origina zonas en donde se da la unión de moléculas de hidrogeno a partir de interacciones no covalentes.

Conclusiones

Cálculos de teoría de funcionales de la densidad permitieron estudiar las propiedades energéticas y de adsorción de hidrógeno molecular en cúmulos de óxido de magnesio. El sistema (MgO)₆ es un sistema con la mayor energía de adsorción y un fuerte candidato para estudios de adsorción acoplados con sistemas de carbono (grafeno).

Referencias

- Sevilla, M.; Mokaya, R. Energy Storage Applications of Activated Carbons: Supercapacitors and Hydrogen Storage. *Energy Environ. Sci.* **2014**, 7 (4), 1250–1280.
- Song, Y.; Guo, Z. X.; Yang, R. Influence of Selected Alloying Elements on the Stability of Magnesium Dihydride for Hydrogen Storage Applications: A First-Principles Investigation. *Phys. Rev. B.* **2004**, 69 (9).
- Shinde, R.; Tayade, M. Remarkable Hydrogen Storage on Beryllium Oxide Clusters: First-Principles Calculations. *J. Phys. Chem. C.* **2014**, 118 (31), 17200–17204.



UNIVERSIDAD DE COLIMA

