

# **II SIMPOSIO DE INVESTIGACIONES EN QUIRALIDAD**

13 de Septiembre 2018  
Ciudad Universitaria, UNAM, México

**Red Interdisciplinaria de Investigación  
en Quiralidad**





RED DE INVESTIGACIÓN  
INTERDISCIPLINARIA EN QUIRALIDAD

INVITA AL

# II SIMPOSIO DE INVESTIGACIONES EN QUIRALIDAD

PLÁTICAS DE ESPECIALISTAS  
EN LAS ÁREAS DE FÍSICA, QUÍMICA, BIOLOGÍA Y MATEMÁTICAS

**13** SEPTIEMBRE  
10:00 a 18:00 hrs.

Auditorio Alejandra Jaidar • Instituto de Física • UNAM

Toda la información en:

<http://naturalezacienciaysociedad.org/2018/08/01/riiq/>

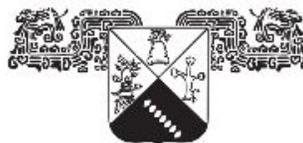
<http://www.fisica.unam.mx/>

## COMITÉ ORGANIZADOR

Penélope Rodríguez • IF UNAM  
Thomas Buhse • CIQ UAEM  
Hugo I. Cruz Rosas • FC UNAM  
Germinal Cocho • IF UNAM



*El Colegio Nacional*



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL  
ESTADO DE MORELOS



Cinvestav



## Participantes y Resúmenes de Ponencias



INSTITUTO  
DE QUÍMICA



Instituto de  
Ciencias  
Nucleares  
UNAM



# ÍNDICE

<i>Moléculas Quirales en el Espacio y Homoquirales en la Tierra</i> Dr. Eusebio Juaristi	4
<i>Origen Fundamental de las Simetrías y sus Violaciones en Átomos y Moléculas</i> Dra Libertad Barrón Palos	5
<i>Quiralidad dentro de Sistemas Biológicos: Origen y Estructura</i> Dr. Héctor Vázquez López	6
<i>Quiralidad en Nanojaulas (Fulerenos) de Oro: El Caso de I-au60</i> Dr. Ignacio L. Garzón	7
<i>Polarización Dicroica del Polvo en el Medio Interestelar</i> Dr. Abraham Luna Castellanos	8
<i>Reconocimiento y Síntesis de Moléculas Quirales</i> Dr. Marcos Hernández Rodríguez	9
<i>Quiralidad en Cúmulos de Au<sub>144</sub> Protegidos con Ligandos: Una Medida Geométrica</i> Dr. Jesús Pelayo Cárdenas	10
<i>Perspectivas en Quiralidad y Racemización en Química Prebiótica</i> Dr. Alejandro Heredia Barbero	11

Autor: **Dr. Eusebio Juaristi**  
Miembro de El Colegio Nacional  
Profesor Emérito del CINVESTAV

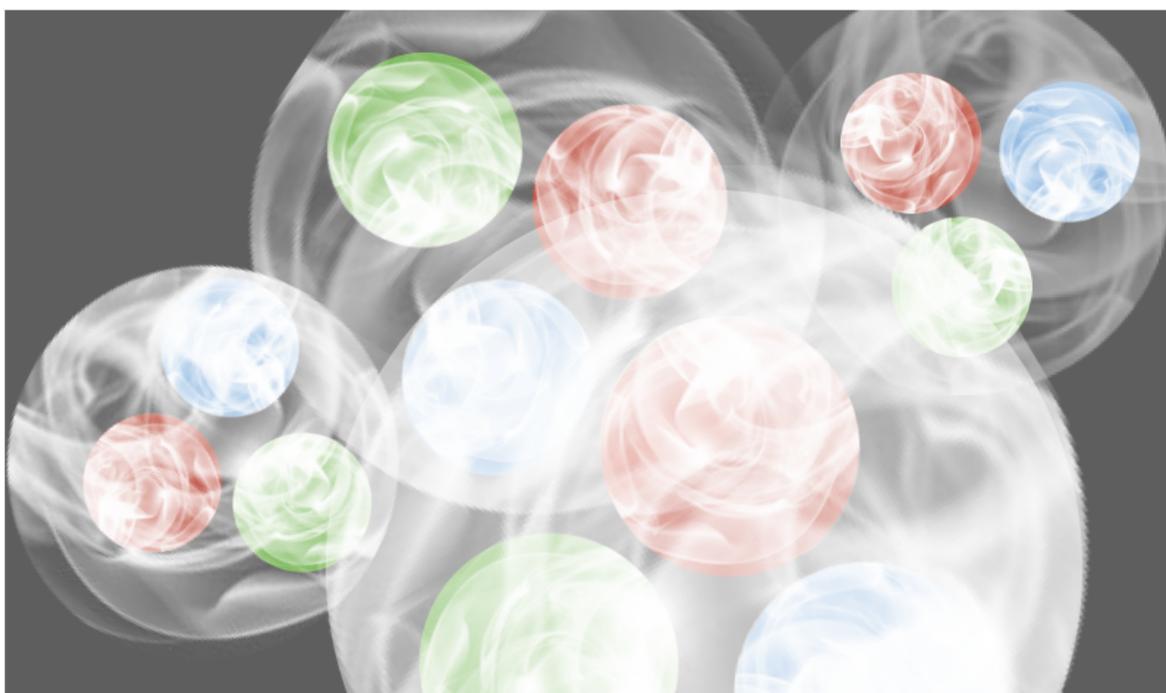
## **MOLÉCULAS QUIRALES EN EL ESPACIO Y HOMOQUIRALES EN LA TIERRA**

En los seres vivos que poblamos la Tierra, los aminoácidos que están presentes en las proteínas son de la forma L, mientras que la ribosa y la desoxirribosa, los azúcares que forman parte del esqueleto de los ácidos ribonucleicos, el ARN y el ADN respectivamente, son de la forma D. ¿Cuál es el origen de la *homoquiralidad* en las biomoléculas, es decir en las moléculas de la vida? ¿Porqué habrá seleccionado la Naturaleza a los L-aminoácidos y a los D-azúcares? A mediados del siglo XIX, Pasteur postuló la existencia de una “fuerza disimétrica” en la Naturaleza, que da lugar a una tendencia intrínseca y permanente por una quiralidad específica en todas las moléculas del Universo, que da lugar a una diferencia energética fundamental entre enantiómeros. En este contexto, en 1956 se observó que el decaimiento de los núcleos atómicos viola el principio de paridad; es decir, este proceso no ocurre con la misma probabilidad que su imagen en el espejo. Alternativamente, la homoquiralidad en los sistemas bioquímicos se ha explicado en términos de fenómenos que alteraron accidentalmente la proporción 50:50 de los enantiómeros posibles en aminoácidos y azúcares, conduciendo eventualmente al predominio observado de las formas L y D, respectivamente. En este contexto, algunos descubrimientos recientes apoyan la teoría de que la homoquiralidad de las biomoléculas esenciales se originó en eventos extraterrestres. Sin embargo, se ha encontrado que los excesos enantioméricos producidos por la luz circularmente polarizada en moléculas quirales tales como los aminoácidos (como los detectados en el meteorito de Murchison) son generalmente muy pequeños, por lo que la naturaleza requirió necesariamente de mecanismos químicos para incrementar la pureza enantiomérica de las biomoléculas relevantes. En este sentido, la autocatálisis asimétrica puede dar lugar a una amplificación de la quiralidad.

Autor: **Dra Libertad Barrón Palos**  
Investigadora del Instituto de Física  
Universidad Nacional Autónoma de México

## ORIGEN FUNDAMENTAL DE LAS SIMETRÍAS Y SUS VIOLACIONES EN ÁTOMOS Y MOLÉCULAS

La violación de las simetrías fundamentales C, P y T (conjugación de carga, paridad e inversión temporal) al nivel más fundamental es el origen de muchos efectos a nivel atómico y molecular, como momentos anapolares, momentos dipolares eléctricos y quiralidad. En esta plática describiré lo que conocemos sobre estas simetrías y sus violaciones, así como los esfuerzos que actualmente se llevan a cabo para mejorar nuestro entendimiento de éstas.



Autor: **Dr. Héctor Vázquez López**  
Investigador de la Facultad de Ciencias  
Universidad Nacional Autónoma de México

## **QUIRALIDAD DENTRO DE SISTEMAS BIOLÓGICOS: ORIGEN Y ESTRUCTURA**

La enantioselectividad presente en los diferentes organismos es una pregunta o preguntas que quedan sin responder. Sin embargo esta selectividad no es del todo estricta, gracias a estudios recientes se ha logrado reconocer el papel de ciertas moléculas como los d-aminoácidos presentes como componentes puntuales en la estructura de diferentes microorganismos, así como su importancia en la síntesis de proteínas y reacciones metabólicas alternas. La incidencia e integración de estos D-aminoácidos tienen una importancia vital y drástica y a la fecha falta más información para conocer en verdad su papel y los diferentes mecanismos que hacen posible, aunque de lo que comentaremos serán al menos de los avances, su relación con el envejecimiento y la diversificación de estos elementos dentro de diferentes metabolismos tanto en escenarios unicelulares como pluricelulares.

Autor: **Dr. Ignacio L. Garzón**  
 Investigador del Instituto de Física  
 Universidad Nacional Autónoma de México

## QUIRALIDAD EN NANOJAULAS (FULERENOS) DE ORO: EL CASO DE $I$ -Au60

La combinación de una quiralidad extrema con una alta simetría en la escala nanométrica es inusual y su estudio abriría líneas de investigación importantes tanto a nivel fundamental como aplicado. En este trabajo<sup>1</sup>, mostramos cómo la estructura electrónica única y el enlace químico de estructuras bidimensionales de oro hacen posible lo anterior. Específicamente, se presenta el rompimiento de la simetría quiral, es decir, la formación espontánea de una monocapa icosaedral quiral ( $I$ -Au60), obtenida de un precursor aquiral ( $I_h$ ), acompañada de una contracción en el enlace químico Au-Au, y por lo tanto del radio de la esfera de átomos de oro, en la cual los 60 sitios son químicamente equivalentes. Esta estructura, que corresponde al más complejo de los poliedros Arquimedeanos, puede considerarse como la solución óptima al problema topológico: como cerrar una red triangular bidimensional con 60 vértices en 3D. La rigidez peculiar del  $I$ -Au60 se manifiesta en propiedades únicas a nivel estructural, vibracional, electrónico y óptico. Estas propiedades serán discutidas como una guía para su detección experimental y su separación para formar materiales macroscópicos.

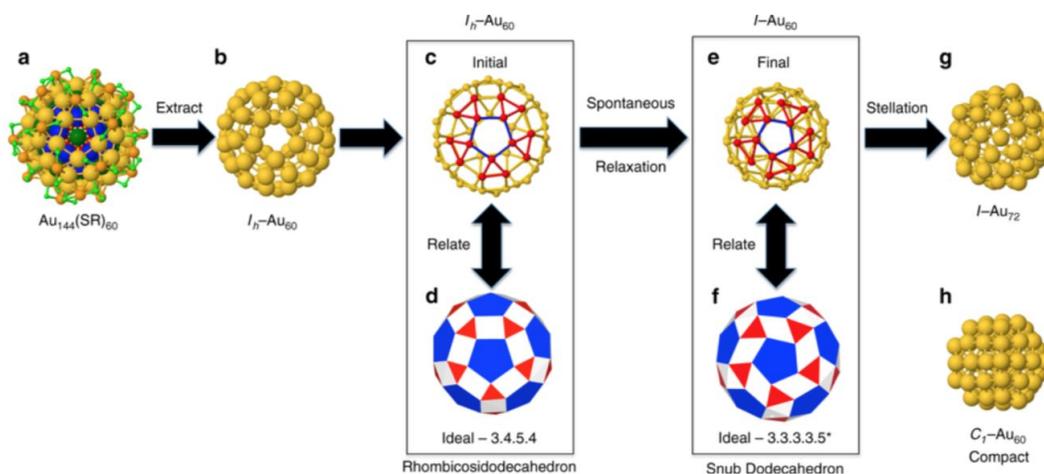


Figura 1. Proceso de la formación espontánea de la nanojaula de oro  $I$ -Au60.

[1] S.-M. Mullins, H.-Ch. Weissker, R. Sinha-Roy, J. J. Pelayo, I. L. Garzón, R. L. Whetten, & X. López-Lozano. "Chiral symmetry breaking yields the  $I$ -Au60 perfect golden shell of singular rigidity". *Nature Communications* **9**, 3352 (2018).

Autor: **Dr. Abraham Luna Castellanos**

Coordinador del Departamento de Astrofísica

Instituto Nacional de Astrofísica Óptica y Electrónica

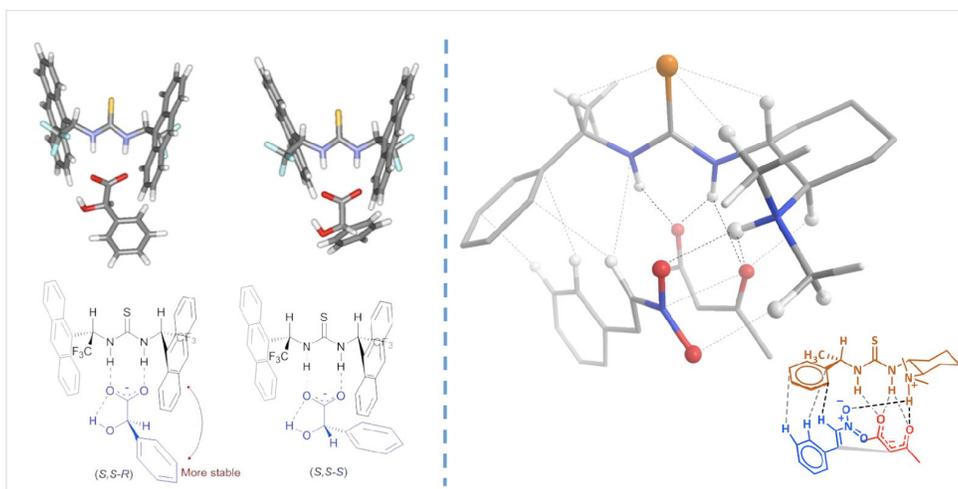
## **POLARIZACIÓN DICROICA DEL POLVO EN EL MEDIO INTERESTELAR**

El medio interestelar presenta varios mecanismos físicos que producen polarización y que es medible con diversas técnicas. Uno de estos fenómenos es la polarización dicroica observada en las nubes de polvo interestelar. El modelo que explica este fenómeno, requiere de la presencia de campos magnéticos y de polvo, polvo que debe tener en su geometría algún grado de "helicidad". Esta geometría favorece la rotación a través de torques radiativos y produce la alineación del eje menor de los granos de polvo con el campo magnético. Para inferir la presencia de campos magnéticos y su influencia en la formación estelar, medimos la polarización de regiones de reciente formación estelar en donde aún existen vestigios de la nube de gas y polvo materna. Para ello, recientemente construimos y calibramos el primer polarímetro de imagen infrarroja en México, los resultados preliminares muestran que los comportamientos son apegados al modelo de polarización dicroica. Sin embargo, en este modelo hay variables que aún quedan poco definidas como: El grado de helicidad y el rol de la quiralidad de los granos de polvo, así como la composición química del polvo y del gas, entre cuyas moléculas, recientemente se reportó la detección de la primera molécula quiral en el medio interestelar.

Autor: **Dr. Marcos Hernández Rodríguez**  
 Investigador del Instituto de Química  
 Universidad Nacional Autónoma de México

## RECONOCIMIENTO Y SÍNTESIS DE MOLÉCULAS QUIRALES

La forma más común de quiralidad en moléculas orgánicas se presenta cuando un carbono tiene cuatro sustituyentes diferentes (Cabcd). Para distinguir entre las dos imágenes especulares de estas moléculas se recurre al modelo de 3 puntos de contacto por Easson-Steadman-Ogston. En este modelo interacciones no covalentes como enlaces de hidrógeno, dipolo-dipolo interacciones  $\pi$ - $\pi$ , etc. logran contacto con 3 de los sustituyentes en la molécula quiral mientras que en su imagen especular esto no es posible. En nuestro grupo de investigación, experimentos de reconocimiento de carboxilatos quirales con tioureas 1,3-disustituidas demuestran que bajo ciertas condiciones del anfitrión y la molécula quiral se logra enantiodiferenciación con dos puntos de contacto. Por otro lado, las enzimas son polipéptidos que catalizan la formación de moléculas quirales. La mayoría de ellas no contienen metales en su sitio activo lo cual implica que interacciones (covalentes o no covalentes) de fragmentos orgánicos pueden promover reacciones. Hace 19 años surge la organocatálisis que es el uso de moléculas orgánicas en cantidades subestequiométricas para acelerar reacciones. Dentro de esta rama, los organocatalizadores bifuncionales tienen en su estructura la capacidad de activar nucleófilo y electrófilo al mismo tiempo al igual que las enzimas. Se muestra el desarrollo de estos sistemas mediante la identificación y aprovechamiento de las interacciones débiles presentes en el estado de transición ( $\text{NH}\cdots\text{O}$  y  $\text{CH}\cdots\pi$ ) para obtener catalizadores que logran enantioselectividades muy altas.



Autor: **Dr. Jesús Pelayo Cárdenas**  
 Investigador del Instituto de Química  
 Universidad Nacional Autónoma de México

## QUIRALIDAD EN CÚMULOS DE $Au_{144}$ PROTEGIDOS CON LIGANDOS: UNA MEDIDA GEOMÉTRICA

La quiralidad es una propiedad muy interesante que puede estar presente en cúmulos atómicos. Debido a que los cúmulos por lo general se encuentran protegidos, conviene conocer si el origen de su quiralidad reside en los átomos que componen sus núcleos, o en los ligandos que los protegen. Previamente ha sido estudiada la quiralidad de cúmulos de oro de entre 18 y 144 átomos, protegidos con ligandos<sup>1</sup>, utilizando una metodología basada en el principio de dividir y proteger, y calculando el índice de quiralidad de Hausdorff<sup>2</sup>. En este trabajo se estudia la quiralidad de cúmulos de  $Au_{144}$  protegidos con ligandos, comparando los resultados previos de la estructura obtenida teóricamente, con los datos experimentales reportados recientemente para cúmulos de  $Au_{144}$  protegidos con grupos alquínulos<sup>3</sup>.

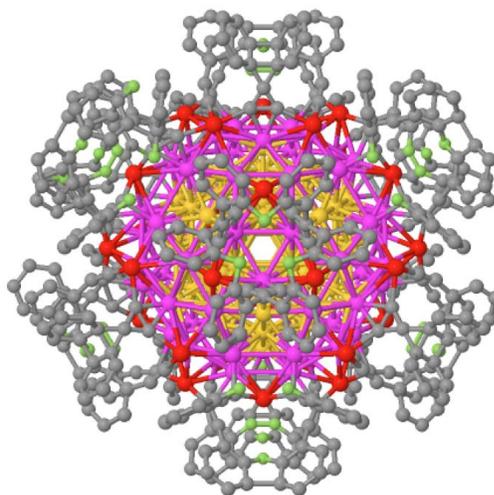


Figura 1. Cúmulo de  $Au_{144}$  protegido con grupos alquínulos, con los átomos de oro indicados en colores diferentes de acuerdo en su ubicación en el sistema: rojo (en las grapas), magenta (capa intermedia de  $Au_{60}$ ), y dorado (en el núcleo interno).

[1] J. J. Pelayo, R. L. Whetten e I. L. Garzón. "Geometric Quantification of Chirality in Ligand-Protected Metal Clusters". *J. Phys Chem. C*, 2015, 119 (51), pp 28666-28678.

[2] A. B. Buda, y K. Mislow. "A Hausdorff chirality measure". *J. Am. Chem. Soc.*, 1992, 114 (15), pp 6006-6012.

[3] Z. Lei, J-J Li, X-K Wan, W-H Zhang y Q-M Wang. "Isolation and Total Structure Determination of an All-Alkynyl-Protected Gold Nanocluster  $Au_{144}$ ". *Angew Chem Int Ed Engl.*, 2018, 57(28), pp 8639-8643.

Autor: **Dr. Alejandro Heredia Barbero**  
Investigador del Instituto de Ciencias Nucleares  
Universidad Nacional Autónoma de México

## PERSPECTIVAS EN QUIRALIDAD Y RACEMIZACIÓN EN QUÍMICA PREBIÓTICA

La quiralidad es una propiedad de la materia que puede ser relevante para la tecnología y para la catálisis química<sup>1,2</sup>. Otro aspecto relevante de este fenómeno, poco entendido por cierto, es que esta posible funcionalidad se tradujera en la formación de la primera célula<sup>3</sup>. En otras palabras, es un hecho concreto que las formas vivientes estamos constituidas por aminoácidos L y azúcares D, y no sabemos cómo entender esta característica de la complejidad biológica. Termodinámicamente, este proceso de separación de moléculas quirales también debe ser estudiado. Estas líneas de investigación y otras, vinculadas a la química prebiótica y química de radiaciones se está estudiando en nuestro grupo de trabajo del Instituto de Ciencias Nucleares, con líneas experimentales y herramientas computacionales. Un ejemplo de nuestra investigación, es la cristalización en campos magnéticos, del aminoácido glicina. Esta molécula se auto-ordena en varios polimorfos y uno de ellos presenta autoensamblamiento helicoidal que da señal en dicroísmo circular. Otro de nuestros trabajos es caracterizar, a distintos niveles, el meteorito Allende. Este meteorito posee aminoácidos y nosotros simulamos computacionalmente el posible comportamiento de estos en los principales minerales de este meteorito. Relacionado a esto, se está estudiando una simulación de aminoácidos D y L alanina, y su mezcla racémica, interactuando con el inosilicato olivina. La alanina D interactúa acoplándose al cristal, mientras que los L son expulsados de las zonas del silicato. Dentro de nuestras simulaciones computacionales, se está analizando actualmente el proceso de racemización de los aminoácidos contemplando estados de transición.

[1] Li, X. *et al.* Chiral polyaniline with superhelical structures for enhancement in microwave absorption. *Chem. Eng. J.* 352, 745–755 (2018).

[2] Yan, Y., Yu, Z., Huang, Y. W., Yuan, W. X. & Wei, Z. X. Helical Polyaniline Nanofibers Induced by Chiral Dopants by a Polymerization Process. *Adv. Mater.* 19, 3353–3357 (2007).

[3] Blackmond, D. G. The Origin of Biological Homochirality. *Cold Spring Harb. Perspect. Biol.* 2, (2010).