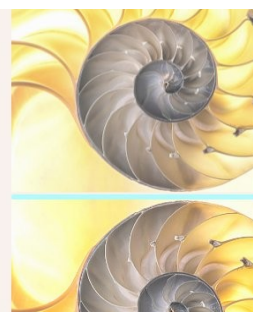




# SIMPOSIO DE IV INVESTIGACIONES EN QUIRALIDAD

11/11  
2021



PLÁTICAS DE ESPECIALISTAS EN LAS ÁREAS  
DE FÍSICA Y QUÍMICA,

## - PROGRAMA -

Hora de la  
Ciudad de México

09:00 - 09:15	Recepción en la sala de Zoom	
09:15 - 09:30	Bienvenida e inauguración del IV Simposio	
09:30 - 10:20	<b>Pedro Cintas</b> <i>Universidad de Extremadura, España</i>	Quiralidad y Ruptura de Simetría Especular: Modelos y Mecanismos
10:20 - 11:10	<b>Svitlana Kopyl</b> <i>Universidad de Aveiro, Portugal</i>	Self-assembled Peptide Nanotubes of Different Chirality: Experiment and Modeling
11:10 - 11:30	Descanso 1	
11:30 - 12:20	<b>David Hochberg</b> <i>Centro de Astrobiología, España</i>	General Evolution Criterion in Chemistry: Bistability and Spontaneous Mirror Symmetry Breaking
12:20 - 13:10	<b>María E. Noble-Terán</b> <i>Universidad Autónoma del Estado de Morelos, México</i>	Desracemización de Viedma: Armando el rompecabezas
13:10 - 13:30	Descanso 2	
13:30 - 14:20	<b>Giuseppe Pirruccio</b> <i>Universidad Nacional Autónoma de México, México</i>	Aumento de los Efectos Quiro-ópticos a la Nanoescala por Medio de Cristales Plasmónicos Aquirales
14:20 - 15:10	<b>Marcelo Muñoz</b> <i>Universidad Austral de Chile, Chile</i>	Determinando la Quiralidad en Productos Naturales. Conceptos, Metodologías y Perspectivas Futuras
15:10 - 15:30	Conclusiones del IV Simposio Acuerdos rumbo al V Simposio	



# IV SIMPOSIO DE INVESTIGACIONES EN QUIRALIDAD

11/11  
2021

PLÁTICAS DE ESPECIALISTAS EN LAS ÁREAS  
DE FÍSICA Y QUÍMICA.

## *Quiralidad y Ruptura de Simetría Especular: Modelos y Mecanismos*

**Pedro Cintas\***  
pecintas@unex.es

**Resumen.** La conservación de la simetría es un fenómeno generalizado en nuestro universo visible. Aún así, la ruptura de simetrías espacio-temporales puede detectarse a distintos niveles de organización, desde el subatómico y atómico hasta el molecular y supramolecular, dando lugar a singularidades que han determinado la evolución de los sistemas físico-químicos, incluyendo la aparición de la vida, al menos en nuestro planeta. Esta presentación mostrará una exploración breve y general de procesos de violación de simetría especular y la generación espontánea de especies homoquirales. Nos concentraremos en particular en transformaciones que implican transiciones de fase, como la cristalización y sublimación, que han sido objeto de nuestro estudio e interés desde hace varios años. Los resultados obtenidos proporcionan modelos y explicaciones plausibles sobre la generación y amplificación de la quiralidad molecular.

---

\*Dpto. Química Orgánica e Inorgánica, Facultad de Ciencias, e IACYS-Unidad de Química Verde y Desarrollo Sostenible, Universidad de Extremadura, Avda. de Elvas s/n, 06006 Badajoz, España.



# IV SIMPOSIO DE INVESTIGACIONES EN QUIRALIDAD

11/11  
2021

PLÁTICAS DE ESPECIALISTAS EN LAS ÁREAS  
DE FÍSICA Y QUÍMICA.

## *Self-assembled Peptide Nanotubes of Different Chirality: Experiment and Modeling*

**Svitlana Kopyl\***  
svitlanakopyl@ua.pt

**Abstract.** Chirality is a property of an object to be non-superimposable on its mirror image. Various chemical and physical aspects of chirality are of recognized scientific importance and are of ongoing research interest not only in life sciences but also in materials science where chirality also plays a crucial role. Self-organized macromolecules tend to form hierarchical structures with an alternation of the sign of chirality in the transition to a higher hierarchical level. Depending on the conformation of the primary structure (L or D), the properties of the material also change. Exemplifying such self-assembled macromolecules are peptide nanotubes (PNTs) based on various amino acids and their dipeptides. Due to their wide ranging physical properties, PNTs are not only important in the study of biomolecular self-organization, but also show promise in various applications in the nanotechnological and biomedical fields. One example of such self-organizing macromolecules is diphenylalanine (FF) peptide nanotubes.

In this work, we will discuss the experimental and theoretical study of the structure and growth kinetics of L-FF and D-FF microtubes. Better understanding the role of chirality in the growth process will allow improving the methods for NTs and MTs fabrication, their better implementation in various functional devices, and may assist in developing new drugs and biomaterials.

---

\*Department of Physics and CICECO – Aveiro Institute of Materials, University of Aveiro, 3810-193, Aveiro, Portugal.



# IV SIMPOSIO DE INVESTIGACIONES EN QUIRALIDAD

11/11  
2021

PLÁTICAS DE ESPECIALISTAS EN LAS ÁREAS  
DE FÍSICA Y QUÍMICA.

## *General Evolution Criterion in Chemistry: Bistability and Spontaneous Mirror Symmetry Breaking*

**David Hochberg\***

hochbergd@cab.inta-csic.es

**Resumen.** La producción, intercambio y el balance de la entropía (la disipación) son conceptos básicos que caracterizan la termodinámica de sistemas abiertos alejados del equilibrio. Generalizamos el criterio general de la evolución (GEC) de Glansdorff y Prigogine, un teorema que impone constricciones en sistemas de reacciones químicas que están sujetos a flujo abierto. El GEC es una desigualdad termodinámica que controla cómo se evolucionan conjuntamente las reacciones internas micro-reversibles con los flujos de materia que el sistema intercambia con su entorno, y como viene ejemplificado por la distribución de las producciones e intercambios de la entropía dentro de una red de caminos de reacción. Validamos el GEC y presentamos el significado físico de la descomposición de la tasa de la disipación con respecto a los distintos caminos, para un modelo del tipo Frank capaz de romper la simetría especular espontáneamente y también para el modelo de Schlögl de la biestabilidad.

**Abstract.** The production, exchange, and balance of entropy (dissipation rate) characterize the thermodynamics of open non-equilibrium systems. We generalize the Glansdorff-Prigogine General Evolution Criterion (GEC) to constrain the entropy balance in volumetric open-flow chemical reaction systems. The GEC is a thermodynamic inequality governing the joint evolution of both the internal microreversible reactions and the matter fluxes that the system exchanges with its environment, as exemplified by the distribution of the entropy productions and exchanges over the network of chemical reaction pathways. We validate this evolution criterion and discuss the physical significance of the pathwise partitioning of the dissipation, rate for a Frank-like model capable of spontaneous mirror symmetry breaking, and we also consider the bistable Schlögl model.

---

\*Centro de Astrobiología, España.



# IV SIMPOSIO DE INVESTIGACIONES EN QUIRALIDAD

11/11  
2021

PLÁTICAS DE ESPECIALISTAS EN LAS ÁREAS  
DE FÍSICA Y QUÍMICA.

## *Desracemización de Viedma: Armando el Rompecabezas*

**María E. Noble-Terán\***

ntme\_fc@uaem.mx

**Resumen.** El rompimiento de la simetría quiral ocurre cuando un proceso físico o químico que no tiene preferencia sobre un enantiómero es capaz de conducir de manera espontánea a un resultado en el cual uno de los dos enantiómeros (D o L) es producido en exceso. A partir de un punto de vista energético ambos enantiómeros tienen la misma probabilidad de existir. Sin embargo, los bloques esenciales de la vida se encuentran casi exclusivamente en una de las dos formas enantioméricas. Encontrándose L-aminoácidos y D-azúcares como componentes de las proteínas y ácidos nucleicos respectivamente. Esta tendencia mejor conocida como homoquiralidad biológica es un ejemplo de rompimiento de la simetría quiral y su origen ha sido sujeto a una ardua discusión dentro de la comunidad científica. El surgimiento de sistemas químicos capaces de manifestar asimetría quiral resultan atractivos para el entendimiento de esta característica de la biosfera. En este sentido, la cristalización de clorato de sodio ( $\text{NaClO}_3$ ) es un ejemplo fascinante de estos sistemas.

Cuando el proceso de cristalización se lleva a cabo a partir de una solución en reposo, el resultado obtenido conserva la simetría quiral. Es decir, de manera estadística se obtienen la misma proporción de cristales L y D. No obstante, la simetría del sistema puede romperse de manera espontánea cuando al inicio, la solución sobresaturada contiene una mezcla 50:50 de cristales quirales de  $\text{NaClO}_3$ . Y que, en presencia de esferas cristalinas es sometida a agitación, alcanzándose un estado homoquiral (Desracemización de Viedma).

En esta plática abordaré los resultados más recientes de nuestro grupo de investigación en función de la Desracemización de Viedma. Mostrando el desarrollo de un modelo cinético que pretende describir el proceso mediante el cual se lleva a cabo el rompimiento de la simetría quiral en este sistema.

---

\*Centro de Investigaciones Químicas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, México.



# IV SIMPOSIO DE INVESTIGACIONES EN QUIRALIDAD

11/11  
2021

PLÁTICAS DE ESPECIALISTAS EN LAS ÁREAS  
DE FÍSICA Y QUÍMICA.

## *Aumento de los Efectos Quiro-ópticos a la Nanoescala por Medio de Cristales Plasmónicos Aquirales*

**Giuseppe Pirruccio\***

pirruccio@fisica.unam.mx

**Resumen.** En esta charla presentamos las propiedades quiro-ópticas del campo electromagnético cercano asociadas con la excitación de resonancias ópticas colectivas en cristales plasmónicos aquirales [1]. Estos cristales están diseñados para soportar resonancias dispersivas multipolares cuyo campo cercano se distribuye en toda la celda unitaria, dando lugar a una respuesta quiro-óptica aumentada. La presencia de resonancias multipolares en cristales que no rompen explícitamente la simetría de inversión se confirma experimentalmente mediante mediciones de extinción de campo lejano, mientras que la dependencia angular, espectral y espacial del campo cercano quiral asociado se simula numéricamente. En contraste con los sistemas pseudoquirales típicos, la respuesta quiro-óptica extendida de campo cercano aparece incluso en incidencia normal.

Creemos que las resonancias de superficie de red en cristales plasmónicos aquirales se pueden utilizar potencialmente como un sustrato para mejorar la enantioselectividad sin background y el reconocimiento sintonizable de moléculas quirales sobre grandes áreas.

[1] E. Petronijevic, E. Mendoza Sandoval, M. Ramezani, C. Ordoñez Romero, C. Noguez, F. Bovino, C. Sibilia, G. Pirruccio+, Extended chiro-optical near-field response of achiral plasmonic lattices, Journal of Physical Chemistry C 123, 23620-23627 (2019).

---

\*Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, México.



RED DE INVESTIGACIÓN  
INTERDISCIPLINARIA EN QUIRALIDAD

# IV SIMPOSIO DE INVESTIGACIONES EN QUIRALIDAD

11/11  
2021

PLÁTICAS DE ESPECIALISTAS EN LAS ÁREAS  
DE FÍSICA Y QUÍMICA.

## *Determinando la Quiralidad en Productos Naturales. Conceptos, Metodologías y Perspectivas Futuras*

**Marcelo Muñoz\***

mamunozflores@uach.cl

**Resumen.** La naturaleza es una fuente rica de compuestos orgánicos de diversa complejidad, los que han sido utilizados por siglos por sus variadas propiedades y beneficios. De ahí que tener la habilidad de conocer sus estructuras ha sido uno de los logros científicos más relevantes de la química orgánica. Sin embargo, la verdadera estructura de estas sustancias naturales va más allá de su composición química y sus enlaces atómicos, ya que muchas de ellas muestran formas tridimensionales quirales. Estas imágenes espejo de idéntica conectividad atómica, no pueden ser distinguidas mediante el uso estándar de las técnicas tradicionales, llevando muchas veces a una elucidación estructural incompleta de los compuestos aislados.

En esta charla, abordaremos la importancia de la quiralidad en sustancias naturales desde el punto de vista químico-biológico, ahondando en conceptos básicos de la estereoquímica tales como estereoisomería, configuraciones relativas y absolutas, y actividad óptica. Luego, recorreremos brevemente algunas de las técnicas mediante las cuales es posible determinar hoy en día la configuración absoluta de las moléculas orgánicas de origen natural. Veremos ejemplos del uso combinado de estas técnicas en metabolitos secundarios como alcaloides, terpenos y otros, intentando visualizar las perspectivas futuras de este campo de la química orgánica.

---

\*Instituto de Ciencias Químicas, Universidad Austral de Chile, Chile.

## COMITÉ ORGANIZADOR:

Centro de Investigaciones Químicas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos:

-María Eugenia Noble Terán

-Hugo I. Cruz Rosas

-Sandra I. Ramírez Jiménez

-Thomas Buhse

Instituto de Ciencias Nucleares, Universidad Nacional Autónoma de México:

-Penélope Rodríguez Zamora

-Héctor Vázquez

-Sergio Ramos

-Alicia Negrón Mendoza

-Alejandro Heredia

Facultad de Farmacia

Universidad Autónoma del Estado de Morelos:

-Jesús Rivera

Facultad de Ciencias en Física y Matemáticas

Universidad Autónoma de Chiapas:

-José Manuel Cruz



Instituto de  
Ciencias  
Nucleares  
UNAM



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL  
ESTADO DE MORELOS



Facultad  
de Farmacia  
*Compromiso al servicio de la salud*



CENTRO DE  
INVESTIGACIONES  
QUÍMICAS

