

DESARROLLO DE MÉTODOS QUIMIOMÉTRICOS MEDIANTE ESPECTROSCOPIA FTIR-HATR PARA CUANTIFICAR PARÁMETROS QUÍMICOS Y PERFIL DE ÁCIDOS GRASOS CIS Y TRANS EN MARGARINA.

D. Maylet Hernández Martínez,¹ Tzayhrí G. Gallardo Velazquez,¹ Guillermo I. Osorio Revilla.² ¹Depto. de Biofísica, ²Depto. de Ingeniería Bioquímica. Escuela Nacional de Ciencias Biológicas-IPN. Prolongación de Carpio y Plan de Ayala. México, D.F., 11340. México. dianamaylet_h@yahoo.com.mx

Los métodos tradicionales para el análisis de composición química y el contenido de ácidos grasos (AG) en los alimentos son lentos, costosos y requieren grandes cantidades de reactivos, por lo que no son accesibles a todas las empresas. En el presente trabajo de investigación se desarrollaron dos métodos quimiométricos para margarina usando espectroscopia FTIR-HATR acoplada al análisis multivariante. Un método predice al mismo tiempo la composición química, perfil de AG y proporciones entre AG que indican la calidad nutricional de margarinas. El otro método clasifica margarina en dos posibles grupos, uno con menos y otro con más de 2.0 g AG trans / 100 g de grasa (límite máximo recomendado de AG trans). El resultado de los métodos se obtiene en 10 minutos, sin la necesidad de pretratar la muestra o el uso de reactivos.

EVALUACIÓN DE LA ACTIVIDAD ANTIPROTOZOARIA Y CITOTÓXICA DE ISOCORDOÍNA Y SUS DERIVADOS SEMI-SINTÉTICOS

T. A. Vela Catzín,¹ R. de L. Borges Argáez,¹ M. Cáceres Farfán,¹ R. E. Moo Puc,² M. Chan Bacab.³ ¹Centro de Investigación Científica de Yucatán, ²IMSS, Mérida, Yucatán, ³Universidad de Campeche. velata@cicy.mx

La leishmaniasis y la tripanosomiasis se encuentran entre las principales enfermedades tropicales más importantes en el hombre causadas por protozoarios. Sin embargo, no hay tratamientos totalmente satisfactorios para ambas enfermedades. En el presente trabajo, se realizó la modificación estructural de isocordoína y la evaluación *in vitro* de 8 derivados hacia promastigotes de *L. mexicana*, epimastigotes de *T. cruzi* y células MDCK. Dos análogos lograron potenciar la actividad tripanocida de 4 hasta 5 veces en comparación con isocordoína. El derivado acetilado fue el de mayor actividad hacia ambos parásitos. El derivado dimetilado mostró la mayor actividad inhibitoria del crecimiento de epimastigotes de *T. cruzi* en comparación con isocordoína y sus demás derivados. También, se obtuvo un compuesto con alto grado de selectividad hacia estos parásitos, que hacia las células MDCK, exhibiendo la más alta actividad leishmanicida y tripanocida.

CONSTITUYENTES CON ACTIVIDAD ANTIHIPERTENSIVA PRESENTES EN *HIBISCUS SABDARIFFA* L. Y ESTUDIO DE LA ESTABILIDAD DEL 3-O-SAMBUBIÓSIDO DE CIANIDINA.

Deyanira Ojeda. Universidad Politécnica de Huatusco, Av. 1 N° 728, Col. Centro. C. P. 94100, Huatusco de Chichuellar, Veracruz, México. dey_ojeda@hotmail.com

Hibiscus sabdariffa es una planta empleada en la medicina tradicional mexicana para el tratamiento de la hipertensión. En el presente trabajo se aislaron 5 metabolitos secundarios con actividad inhibitoria de la Enzima convertidora de angiotensina (ECA): 3-O-sambubiósido de cianidina, 3-O-sambubiósido de cianidina, ácido 3-O-cafeoilquinico, ácido 4-O-cafeoil quinico y ácido 5-O-cafeoilquinico. Ambos sambubiósidos inhiben a la ECA de una forma competitiva, siendo más efectivo el 3-O-sambubiósido de delfinidina; además, se determinaron las constantes de disociación para la unión del inhibidor con la enzima libre (K_i) para la inhibición de la ECA. Por otra parte, se determinó la constante de autoasociación (K_a) para el 3-O-sambubiósido de cianidina y se llevó a cabo la formación de complejos de copigmentación entre este antociano y el ácido 5-O-cafeoilquinico a diferentes relaciones molares a pH 2.

“ORIGEN Y CONSECUENCIAS DE LAS INTERACCIONES QUE DETERMINAN EL RECONOCIMIENTO MOLECULAR ENTRE CARBOHIDRATOS Y COMPUESTOS AROMÁTICOS (CH/π), LA REACTIVIDAD EN CICLOADICIONES DE DIELS-ALDER (π-π) Y LA CONFORMACIÓN (CH...OP)”

Karla Elizabeth Ramírez Gualito. Instituto de Química – UNAM,

El objeto de estudio de la Química es la reactividad que no es otra cosa que el cambio de conectividad que experimentan las moléculas cuando se les aplica energía. Esto es, los átomos que están conectados de una manera en un reactivo, aparecen conectados de otra manera en los productos. La energía está asociada al proceso y por eso hay algunos arreglos que se privilegian sobre otros, energía bien medida que corresponde con la del estado de transición. Por esto, la formación y ruptura de enlace es fundamental y de ahí la necesidad de definir enlace químico. Pero ¿sólo deben considerarse los enlaces fuertes en la definición? Además de los llamados enlaces covalentes, existen enlaces entre átomos a larga distancia, que son estables y que se producen por la acumulación de densidad electrónica entre núcleos. Éstos constituyen un mínimo en la dirección de aproximación de los átomos enlazados, al igual que los enlaces fuertes, cualquier cambio en la distancia núcleo-núcleo implica un aumento en la energía. Dado que éstos no entran en las definiciones convencionales, algunos autores las llaman *interacciones* o *contactos*, pero todas obedecen a un mismo fenómeno, la acumulación de densidad electrónica entre dos núcleos. Así, esta tesis presenta el trabajo relacionado con el estudio de tres tipos de enlace débil, que son el corazón de la química supramolecular. La interacción CH/π, que ilustrada con la interacción de un carbohidrato y benceno en una primera etapa y el reconocimiento entre carbohidratos y proteínas a nivel biológico. Esta interacción se estudia en el **Capítulo 2** y comprende el desarrollo de una metodología que permite establecer la magnitud de la interacción y la región molecular donde se produce. La energía de interacción determinada fue de 10 kJ/mol lo que confirma el resultado de los cálculos teóricos. Para poder identificar la región donde la interacción se produce, se utilizó RMN, con la cual a través de la medición del efecto nuclear de Overhauser así como los cambios en el desplazamiento químico se pudo confirmar que los son protones 3, 4 y 5 del anillo de la galactosa los que interaccionan con la cara del anillo de benceno. Una segunda interacción, es la interacción π-π que se estudió en complejos de transferencia de carga que aparecen en la reacción de Diels-Alder y se presenta en el **Capítulo 3**. El impacto de los resultados es tal, que permite establecer que todas las explicaciones sustentadas en el estudio de los orbitales HOMO-LUMO, interacciones secundarias, etc. son cuestionables y que los complejos se originan por fuerzas de dispersión. Finalmente en el **Capítulo 4**, se aborda la interacción CH/n, un tipo de puente de hidrógeno no convencional, donde un par de electrones no compartidos interactúan con un átomo de hidrógeno polarizado. Nuestros resultados permiten establecer que el llamado efecto anomérico generalizado en el segmento SCP(O) no existe. Esta conclusión proviene de la aplicación de una nueva metodología para medir barreras rotacionales distorsionadas por la aparición de la interacción CH/n.