

Premio a las Mejores Tesis en Ciencias Químicas “Rafael Illescas Frisbie” 2016 en Maestría: M. en C. Miguel Reina Tapia

El Mtro. Reina Tapia cursó sus estudios de licenciatura en Química en la Facultad de Química de la Universidad Nacional Autónoma de México, la maestría en Ciencias e Ingeniería de Materiales en el Instituto de Investigaciones en Materiales de la UNAM en la cual obtuvo Mención Honorífica con un promedio de 9.78 y donde actualmente cursa el Doctorado en la misma área.

El Maestro en Ciencias e Ingeniería de Materiales Miguel Reina Tapia, fue acreedor al Premio Rafael Illescas Frisbie a las Mejores Tesis en Ciencias Químicas en la categoría de Maestría en la edición 2016 con la tesis “Silibina, sus derivados y su interacción con cúmulos metálicos: un estudio teórico” bajo la dirección de la Dra. Ana María Martínez Vázquez.

Resumen de la tesis.

En este trabajo de tesis se estudiaron las moléculas silibina, 2,3-dehidrosilibina y seis de sus derivados. Se analizaron aspectos estructurales ligados a la estabilidad, y se compararon los espectros de caracterización teóricos de UV-visible y Raman con el objetivo de poder seguir analíticamente la oxidación de silibina a 2,3-dehidrosilibina, y de determinar la presencia de los diferentes sustituyentes. También se analizó la capacidad antirradicálica de estos sistemas a pH fisiológico.

Se optimizaron las geometrías de la silibina y la 2,3-dehidrosilibina. De cada una de estas moléculas se optimizaron cinco derivados monometilados y una molécula sin grupos metoxi ($-\text{OCH}_3$). Para la silibina y la 2,3-dehidrosilibina se llevó a cabo un estudio que muestra la importancia de los puentes de hidrógeno intramoleculares.

Para estudiar la capacidad antirradicálica de la silibina, la 2,3-dehidrosilibina y sus derivados se llevó a cabo un análisis sobre la abundancia relativa de las especies a $\text{pH}=7.4$ en el que se concluyó que cerca de 70% de la silibina se encuentra sin desprotonar, pero alrededor de 60% de la 2,3-dehidrosilibina se encuentra desprotonada, por lo que las propiedades antirradicálicas de estas moléculas cambian con el pH. Se construyó el mapa donador-aceptor de electrones en el que se comparó la capacidad de aceptar y donar electrones de las especies neutras, desprotonadas y doblemente desprotonadas con el objetivo de analizar si podían reaccionar con los radicales libres $\bullet\text{OOH}$, $\text{NO}_2\bullet$ y $\text{DPPH}\bullet$. Por último, se realizó el estudio de la formación de aductos como mecanismo para estabilizar al radical libre $\bullet\text{OOH}$.

Se estudió la interacción de cúmulos metálicos formados por cuatro átomos de Cu, Ag y Au (neutros y globalmente cargados



Foto: M. en C. Miguel Reina Tapia.

de acuerdo con los estados de oxidación más comunes). Se propone que la presencia de los metales aumenta la intensidad de las señales Raman y UV- visible. Esto se sugiere para aumentar la sensibilidad de los métodos de detección.

Además, se estudió cómo la presencia de estos metales mejora la capacidad antirradicálica de la silibina. Por último, se llevó a cabo el estudio de la interacción de cúmulos mixtos binarios y ternarios y se observó que debido a la naturaleza de los cúmulos existían cambios en los espectros de caracterización que permiten detectar silibina de una forma más sensible, además de que estos sistemas pueden modular incrementando la capacidad antirradicálica de la silibina.

Publicaciones derivadas:

Reina, M.; Martínez, A. Silybin and 2,3-dehydrosilybin flavonolignans as free radical scavengers. *J. Phys. Chem. B.*, **2015**, *119*, 11597-11606.

Reina, M.; Martínez, A. Is Silybin the Best Free Radical Scavenger Compound in Silymarin? *J. Phys. Chem. B.*, **2016**; *120*(20): 4568-78. doi: 10.1021/acs.jpcc.6b02807. Epub 2016 May 11.