

Síntesis sustentable, caracterización química-fotofísica, y por DFT de BOSCHIBA derivadas de aminoácidos y su aplicación *in vitro*

Protocolo de tesis de maestría

Pablo E. Alanis

2023–11–30

Universidad Autónoma de Nuevo León, División de Posgrado

Resumen

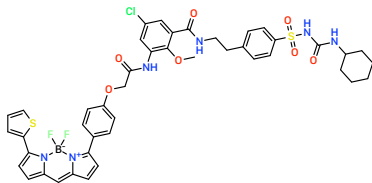
Introducción

Resumen

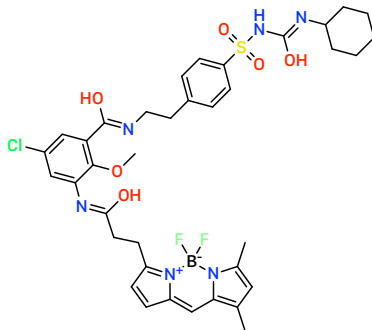
Se sintetizarán una serie de Bases de Schiff de Boro (*del inglés “Boron Schiff Bases”*) (BOSCHIBA) derivadas de glicina, L-triptófano, L-tirosina y L-fenilalanina. Se caracterizarán por métodos espectroscópicos y se realizarán cálculos *in silico* por medio de Teoría del funcional de la densidad (*del inglés “Density Functional Theory”*) (DFT) y Teoría del funcional de la densidad tiempo-dependiente (*del inglés “Time-Dependant Density Functional Theory”*) (TDDFT) para estudiar las propiedades fotofísicas de los compuestos y comprobar los mecanismos involucrados en el efecto supresor de la luminiscencia en dichos compuestos así como estudios de topológicos sobre los mismos. A su vez, se realizarán estudios de citotoxicidad y tinción *in vitro* para determinar su actividad biológica de los compuestos.

Introducción

- Interés en compuestos fluorescentes de boro;
- Amplio campo de aplicaciones;
- BODIPY comercialmente disponibles;
 - Utilizados como agentes para la tinción celular:
 1. ER-Tracker™ Green, y;
 2. ER-Tracker™ Red.



(a) ER-Tracker™ Blue



(b) ER-Tracker™ Green

Esquema 1: Los *ER-Tracker™ Green* y *ER-Tracker™ Red* de Thermo Fischer Scientific™ son boron-dipyrromethene (BODIPY) comerciales utilizados como agentes para la tinción celular.

Fluoróforos sensibles a la viscosidad i

- Los Rotores Moleculares Fluorescentes (*Del inglés “Fluorescent Molecular Rotor”*) (FMR) son fluoróforos sensibles a la viscosidad.
- Presentan una rotación libre que se vuelven fluorescentes.
- Aumentan la fluorescencia solo si su rotación se ve restringida.

- Algunas interacciones de carácter intramolecular para detener la rotación de los FMR son:
 - i. Formar interacciones de hidrógeno;¹
 - ii. A través del impedimento estérico;² o
 - iii. Por la formación de complejos estables con iones metálicos.³

¹ Wu+18.

² Fau+16.

³ Yad+19.

Fluoróforos sensibles a la viscosidad iii

- Se ha determinado que la polaridad del solvente y la viscosidad del mismo afectan considerablemente la fluorescencia de los FMR.
- El efecto que tiene la polaridad del solvente, aunque se sabe que es importante, no se ha logrado elucidar de forma aislada a la viscosidad.⁴

⁴M.A. Haidekker et al. «**Effects of Solvent Polarity and Solvent Viscosity on the Fluorescent Properties of Molecular Rotors and Related Probes**». En: *Bioorganic Chemistry* 33.6 (dic. de 2005), págs. 415-425. ISSN: 00452068. DOI: 10/dhw8f2.

Referencias

- [Fau+16] Adele Faulkner et al. «**Allosteric Regulation of the Rotational Speed in a Light-Driven Molecular Motor**». En: *Journal of the American Chemical Society* 138.41 (19 de oct. de 2016), págs. 13597-13603. ISSN: 0002-7863, 1520-5126. DOI: 10/gsqwpr.

- [Hai+05] M.A. Haidekker et al. «**Effects of Solvent Polarity and Solvent Viscosity on the Fluorescent Properties of Molecular Rotors and Related Probes**». En: *Bioorganic Chemistry* 33.6 (dic. de 2005), págs. 415-425. ISSN: 00452068. DOI: 10/dhw8f2.
- [Wu+18] Yingying Wu et al. «**A Multistage Rotational Speed Changing Molecular Rotor Regulated by pH and Metal Cations**». En: *Nature Communications* 9.1 (16 de mayo de 2018), pág. 1953. ISSN: 2041-1723. DOI: 10/gdkpwz.

- [Yad+19] Richa Yadav et al. «**A Viscochromic, Mechanochromic, and Unsymmetrical Azine for Selective Detection of Al³⁺ and Cu²⁺ Ions and Its Mitotracking Studies**». En: *New Journal of Chemistry* 43.18 (2019), págs. 7109-7119. ISSN: 1144-0546, 1369-9261. DOI: 10/gsqwps.

Glosario

BODIPY	Boron-DIPYrromethene.
BOSCHIBA	Bases de Schiff de Boro (<i>del inglés "Boron Schiff Bases"</i>).
DFT	Teoría del funcional de la densidad (<i>del inglés "Density Functional Theory"</i>).
FMR	Rotores Moleculares Fluorescentes (<i>Del inglés "Flurescent Molecular Rotor"</i>).
TDDFT	Teoría del funcional de la densidad tiempo-dependiente (<i>del inglés "Time-Dependant Density Functional Theory"</i>).