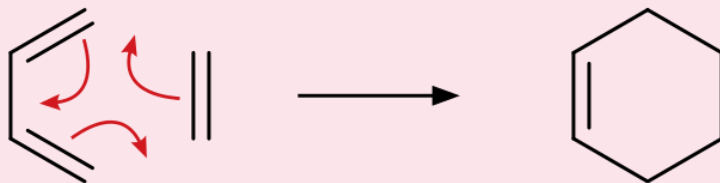


Determinación computacional de la ruta biogenética de las cheiloclinas A-I a través de métodos multiescala

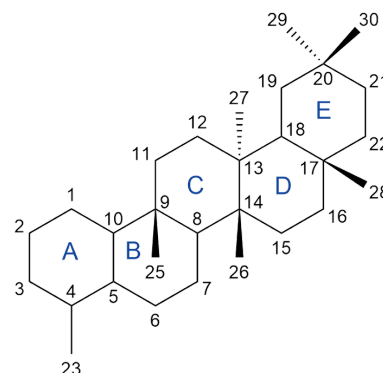
Briceño-Vargas Flor María, Quijano-Quifones Ramiro Felipe, Mirón-López Gumersindo
A15001548@alumnos.uady.mx, flormariamontserrat@gmail.com, Número de CVU: 1325069

La **reacción de Diels-Alder** es una de las más importantes en la química



¡Más de **400** productos naturales podrían ser Diels-Alder!¹

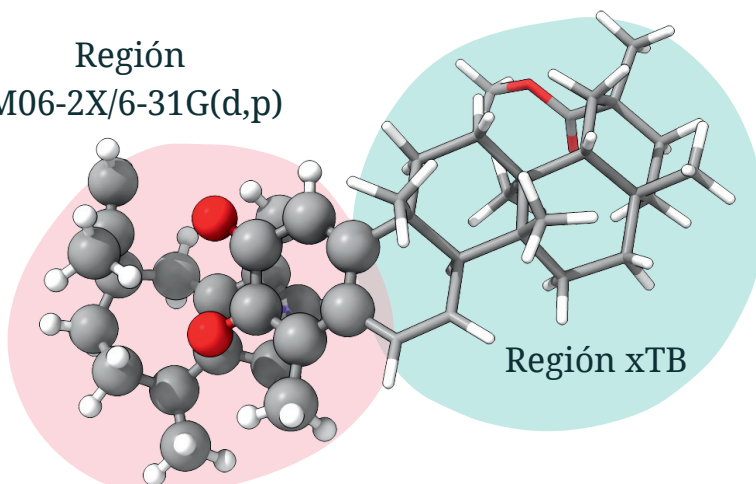
Las plantas de la familia **Celastraceae** son ricas en estos compuestos, **en su mayoría, dímeros de terpenos**²



Entre éstos, destacan las **cheiloclinas A-I**, cuya hipótesis biogenética las señala como **productos naturales tipo Diels-Alder**³

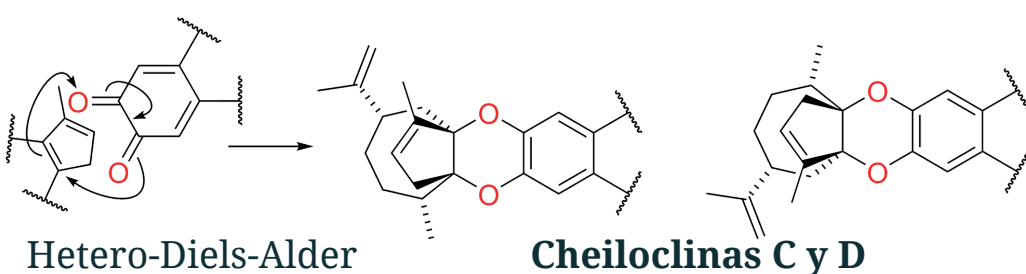
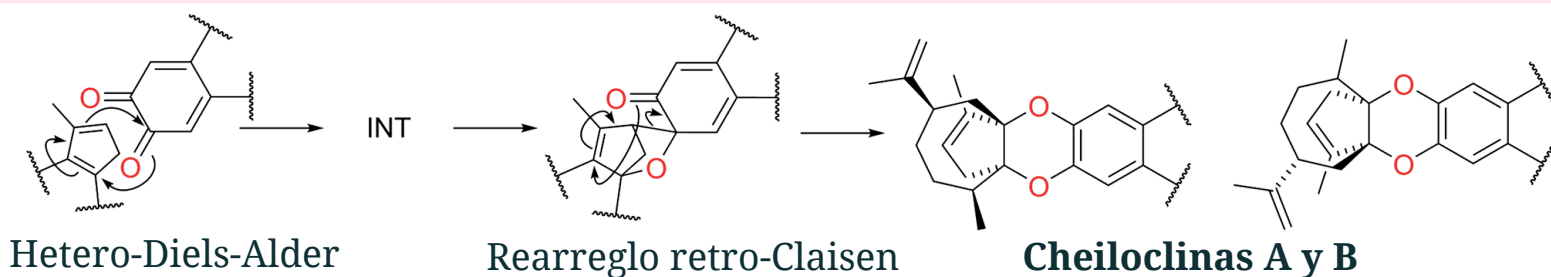
La hipótesis biogenética fue puesta a prueba mediante **cálculos computacionales ONIOM2 (M06-2X/6-31G(d,p) : xTB)**

Región M06-2X/6-31G(d,p)



Región xTB

Los resultados preliminares indican **dos mecanismos de biogénesis**:



Cheiloclina	$\Delta G^\ddagger_1$	$\Delta G^\ddagger_2$
A	21.76	21.75
B	17.95	17.76
C	32.64	N/A
D	33.72	N/A

ΔG en kcal/mol

Resultados similares se han reportado para otros dímeros⁴, sugiriendo la existencia de **procesos alternos** para la formación de las cheiloclinas.

(1) *Nat. Prod. Rep.* **2004**, 21 (3), 321–352. <https://doi.org/10.1039/B305068H>.

(2) *Phytochem Rev* **2018**, 17 (4), 669–690. <https://doi.org/10.1007/s11101-018-9553-5>.

(3) *Tetrahedron* **2005**, 61 (2), 429–436. <https://doi.org/10.1016/j.tet.2004.10.074>.

(4) *Molecules* **2018**, 23 (10), 2505. <https://doi.org/10.3390/molecules23102505>.