

# Química cuántica para pájaros

Ana Martínez Vázquez

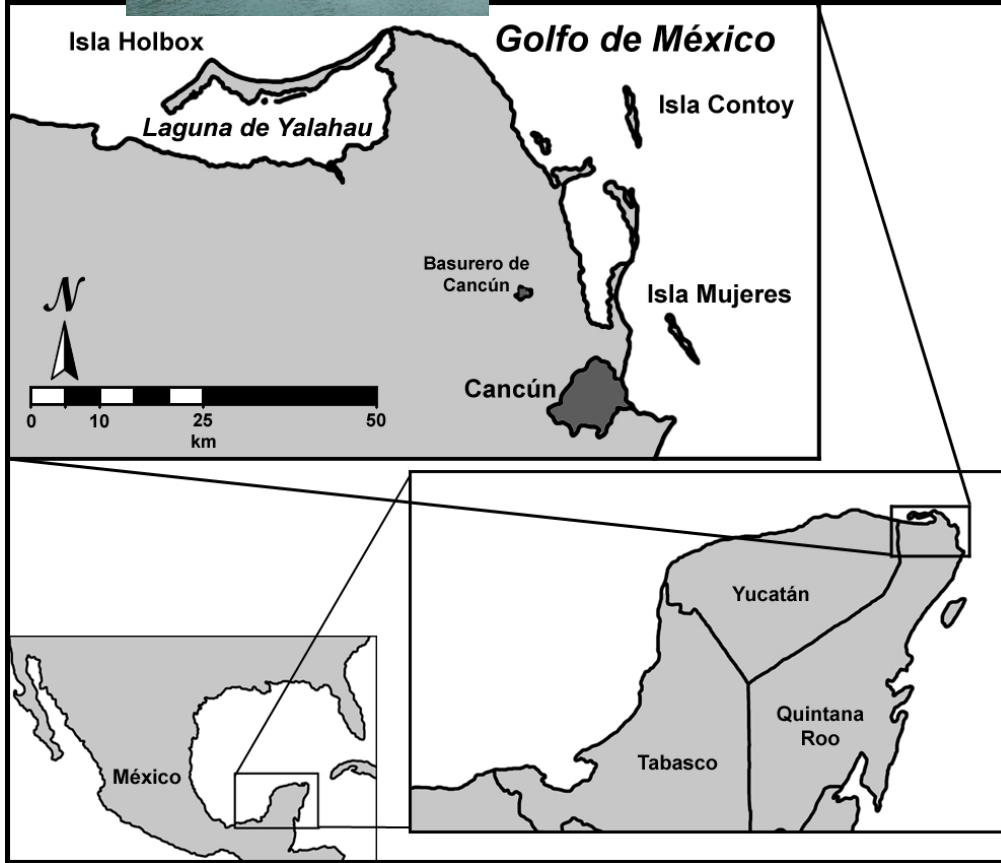
Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM,  
México (martina@iim.unam.mx)

Andrés Barbosa, Miguel Ángel Rodríguez-Gironés (EEZA,CSIC)  
Miguel Costas (Facultad de Química, UNAM), Rubicelia Vargas y  
Annia Galano (UAM-Iztapalapa)

# Antecedentes

- En el IIM de la UNAM tenemos una línea de investigación desde el 2003 que se llama *materiales para la restauración ecológica*
- Antes de **restaurar** hay que **diagnosticar**

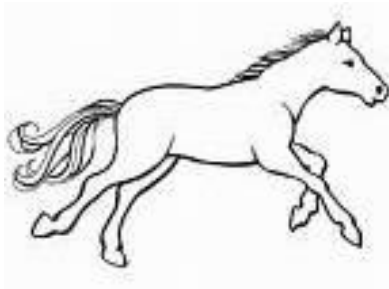
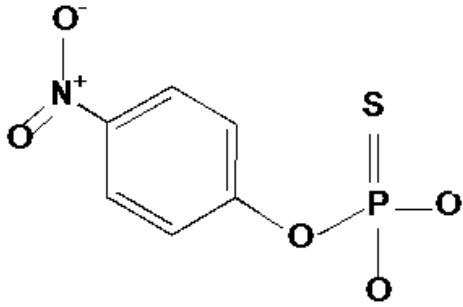
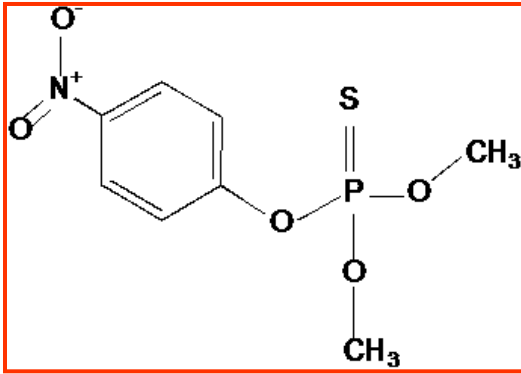




Para continuar con el **diagnóstico** ¿qué tal analizar los efectos de materiales como los **insecticidas** que son materiales diseñados para matar?

¿de dónde viene la idea?

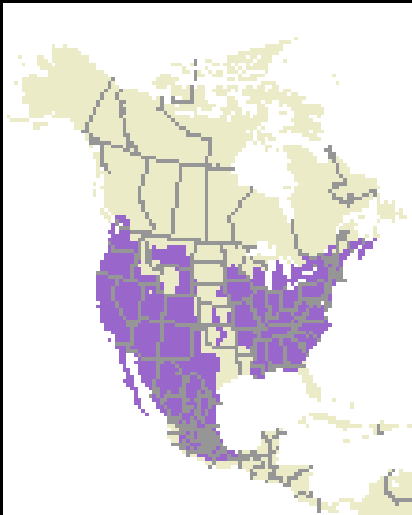
# metil paration



# Ideas Previas

# Insecticidas y *Carpodacus*

*Carpodacus mexicanus* “debe” sus colores a los carotenoides, que a su vez son antioxidantes ... Se sabe que los carotenoides están en la dieta, y que de la dieta depende el color



Un bicho contaminado o enfermo  
**SACRIFICA** el color por usar las sustancias  
en sanar ... Los carotenoides no se depositan  
en las plumas porque se utilizan en el  
metabolismo



rojo → amarillo



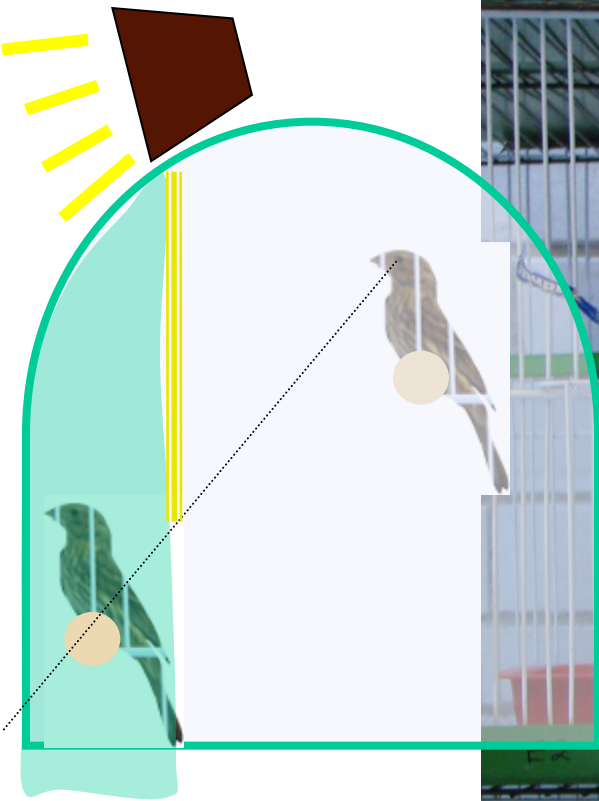
ser rojo es ser mejor antioxidante

Las “chicas” lo saben



¿Cómo saben que las chicas lo  
saben?





¿rojo es mejor antioxidante?

Empecemos por el principio ...

... ¿qué significa ser antioxidante?

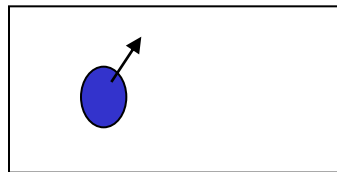
Antioxidante significa que atrapa radicales libres y con eso reduce el estrés oxidativo

Lo importante es evitar los radicales libres

... antioxidante es capaz de atrapar radicales libres .... le vamos a llamar **antiradical**

# ¿Qué es un radical libre?

un **radical libre** es un ELECTRÓN SIN PAREJA Y  
POR LO MISMO ES MUY REACTIVO,  
REACCIONA CON TODO, ROMPE ENLACES,  
OXIDA ... EN RESUMEN ... **ES UN DESASTRE**



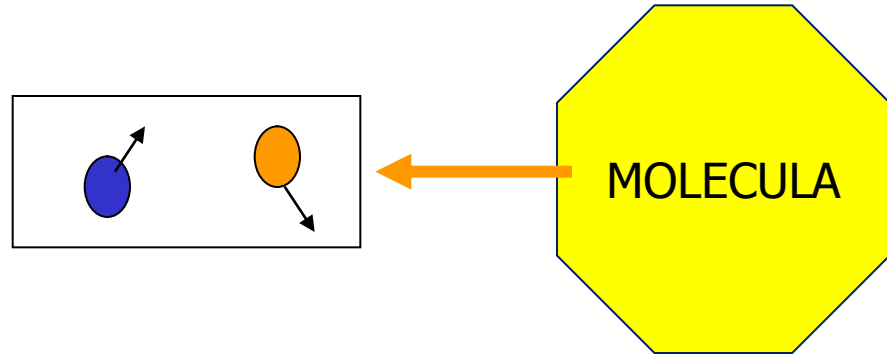
combatirlo es emparejarlo

Una forma de atrapar o combatir  
radicales libres es con la transferencia  
de electrones ..

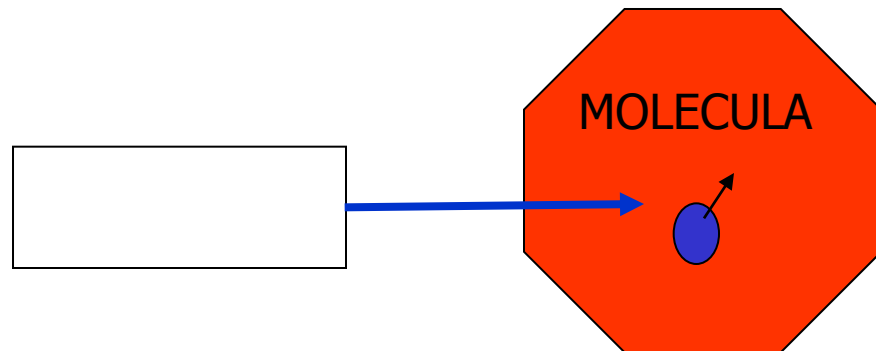
... que ha de ser la más rápida

hay al menos dos formas de  
“*transferir electrones*”...

- dando



- aceptando



Capacidad para donar un electrón al radical  
libre

(Energía de Ionización (VIE))

Capacidad de aceptar un electrón del radical  
libre

(Afinidad Electrónica (VEA))

# Sólo necesitamos calcular VIE y VEA

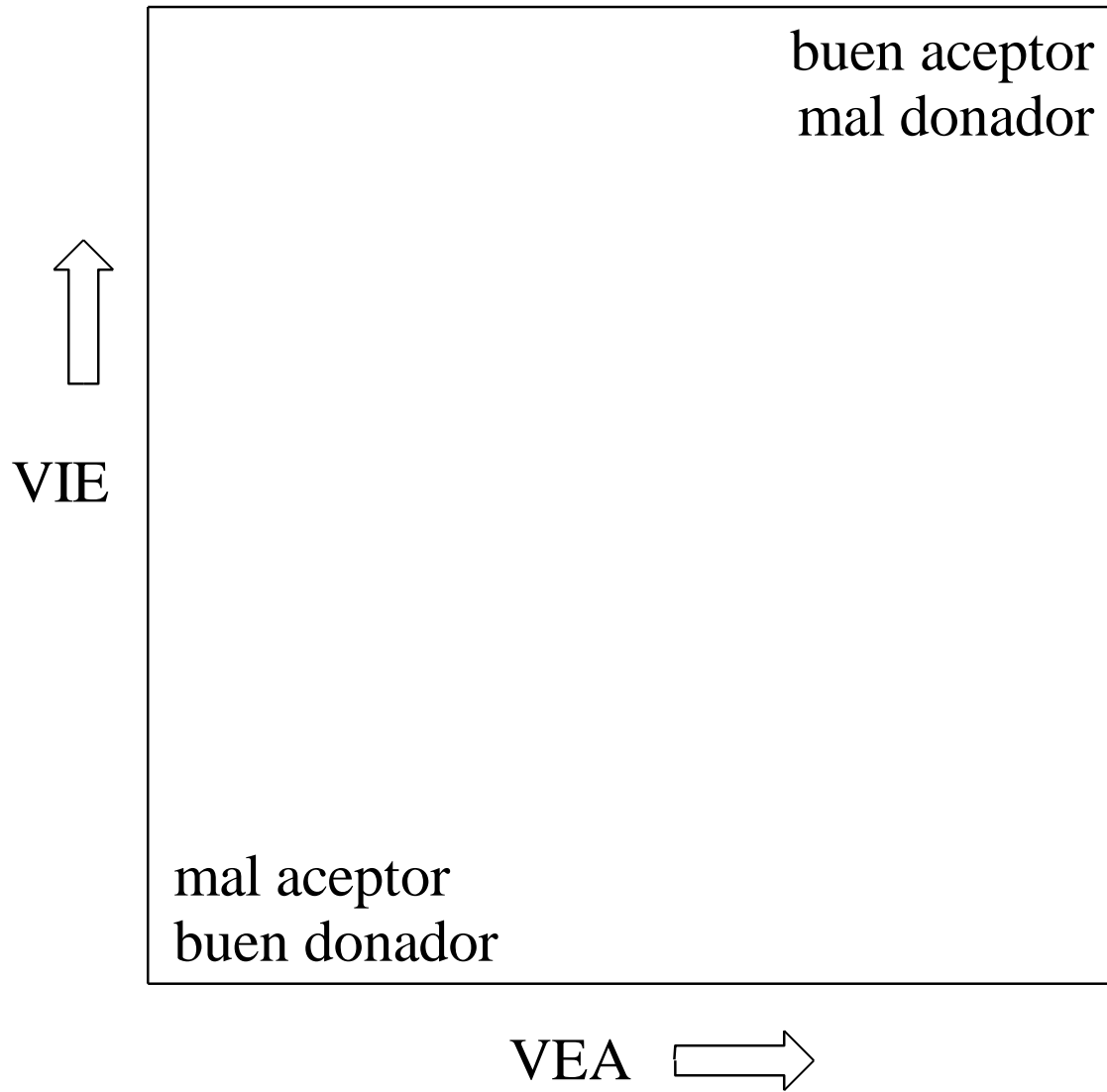


$$VIE = E(M^+) - E(M)$$



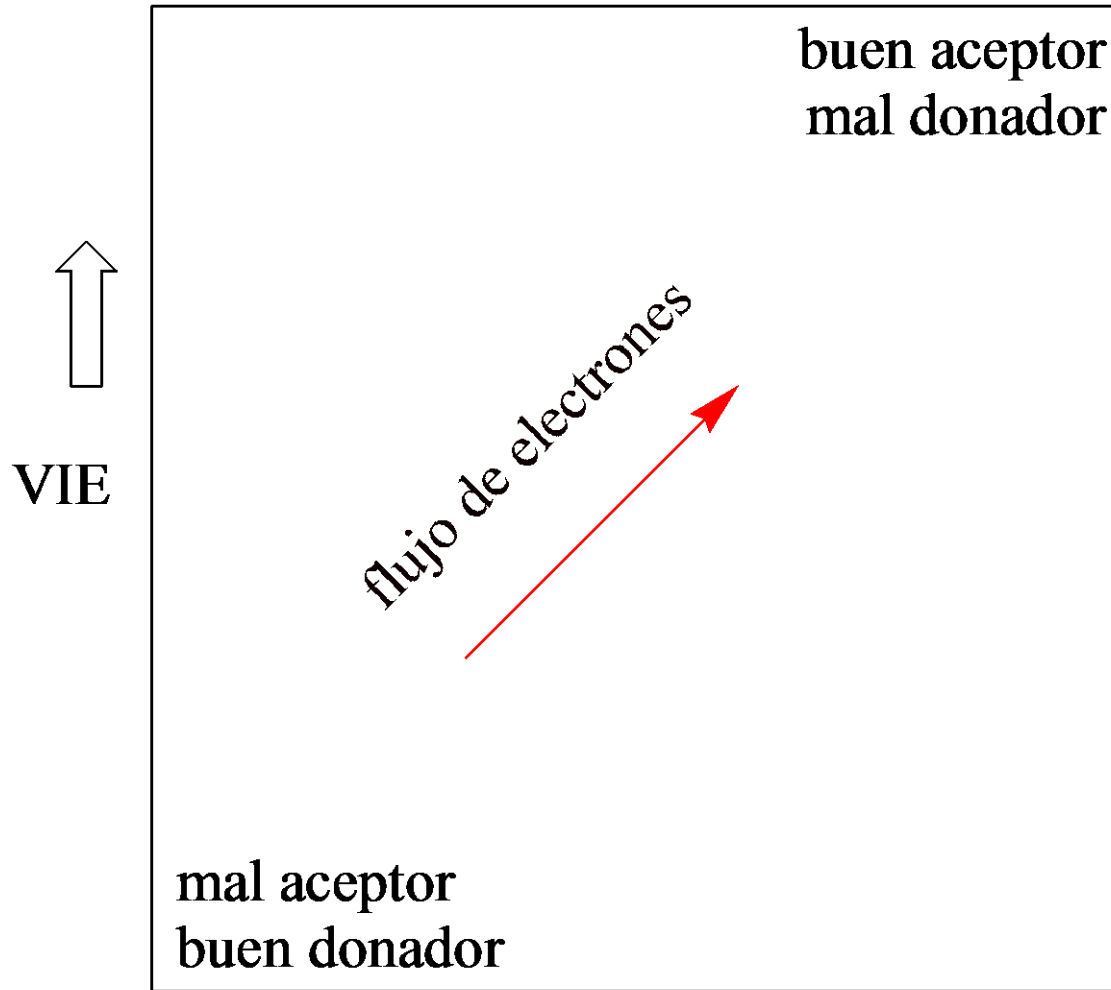
$$VEA = E(M) - E(M^-)$$

# Full Electron Donor Acceptor Map (FEDAM)



# Full Electron Donor Acceptor Map (FEDAM)

Arriba derecha

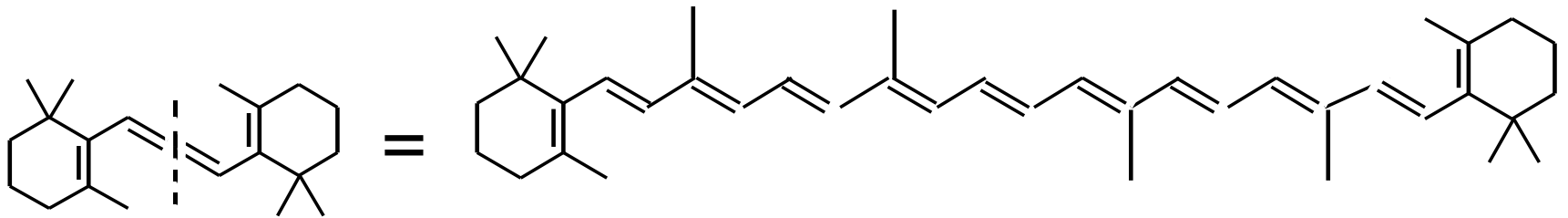


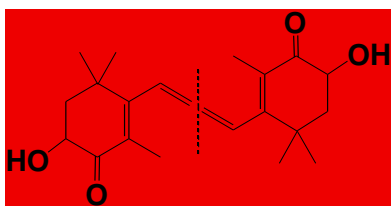
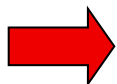
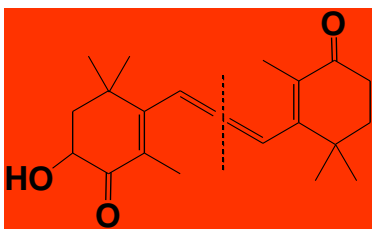
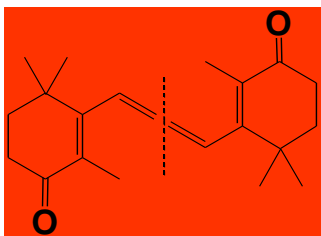
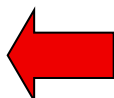
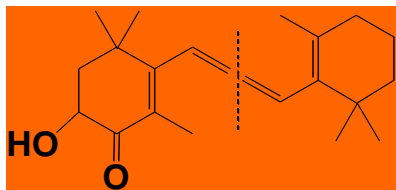
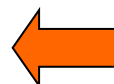
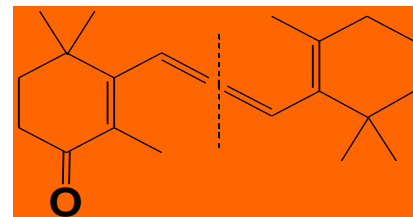
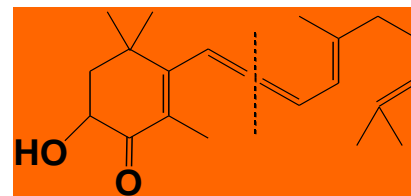
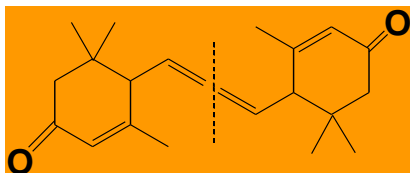
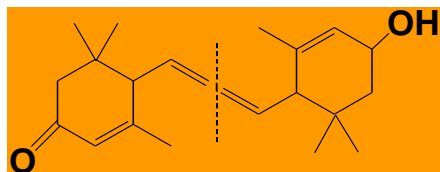
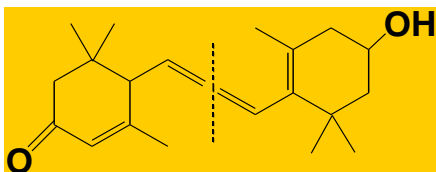
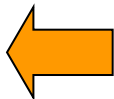
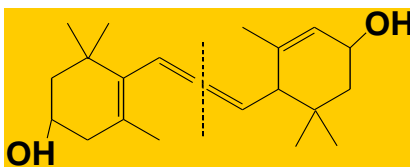
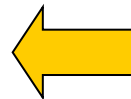
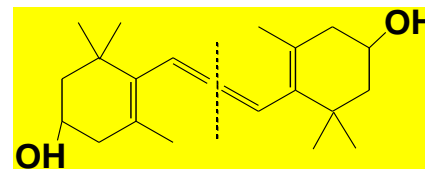
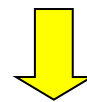
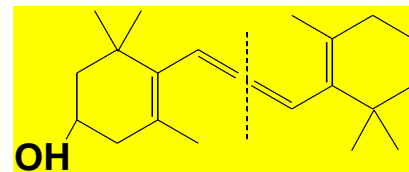
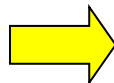
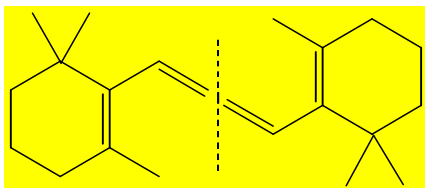
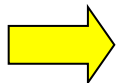
Abajo izquierda

VEA →

¿Ser rojo es ser mejor?

## CAROTENOS



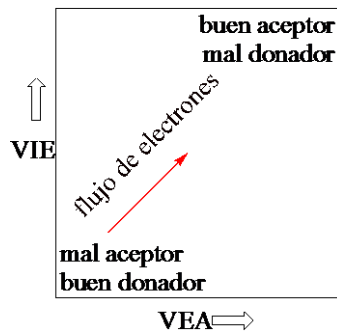
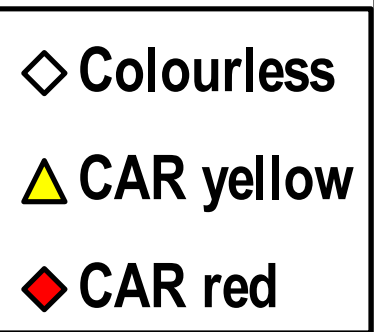


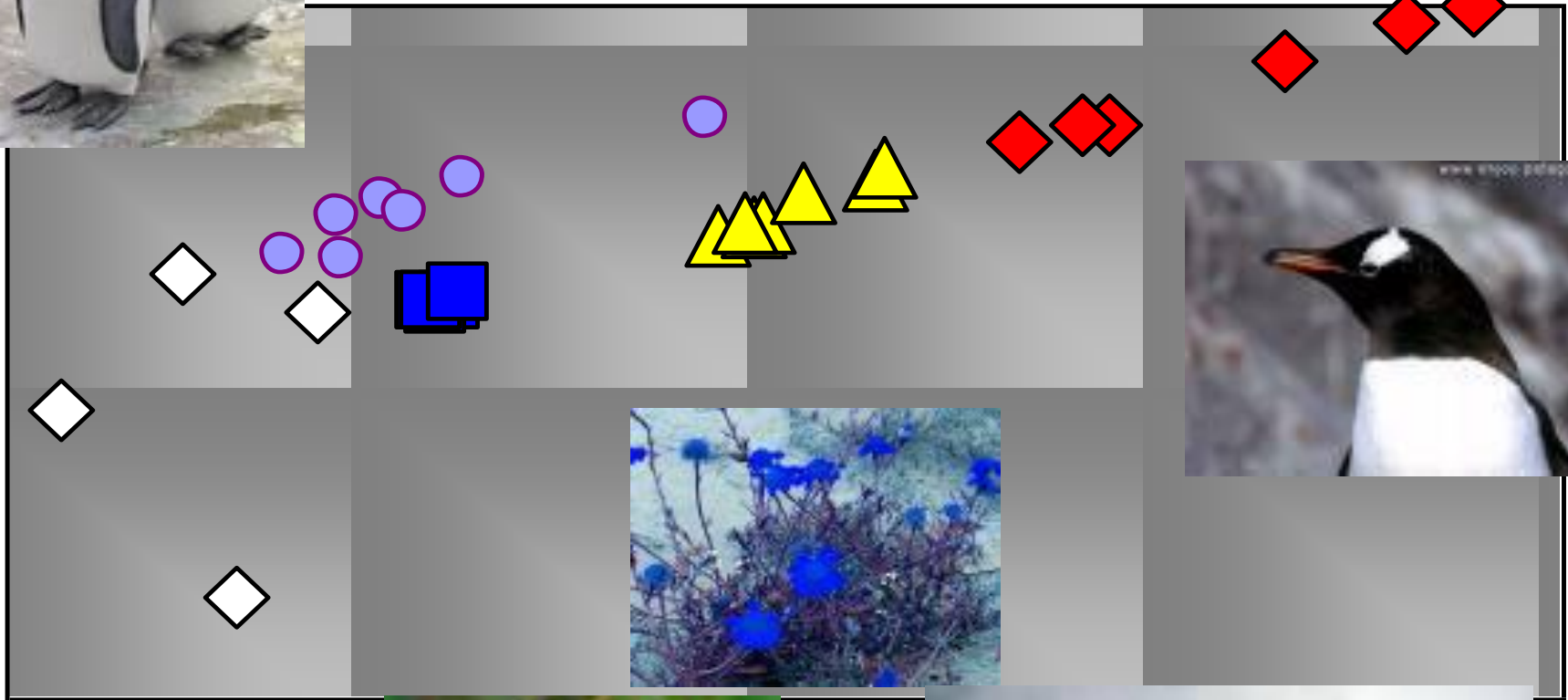
2.2

0.0

0.0

1.0





Carotenos pueden DONAR y  
ACEPTAR electrones

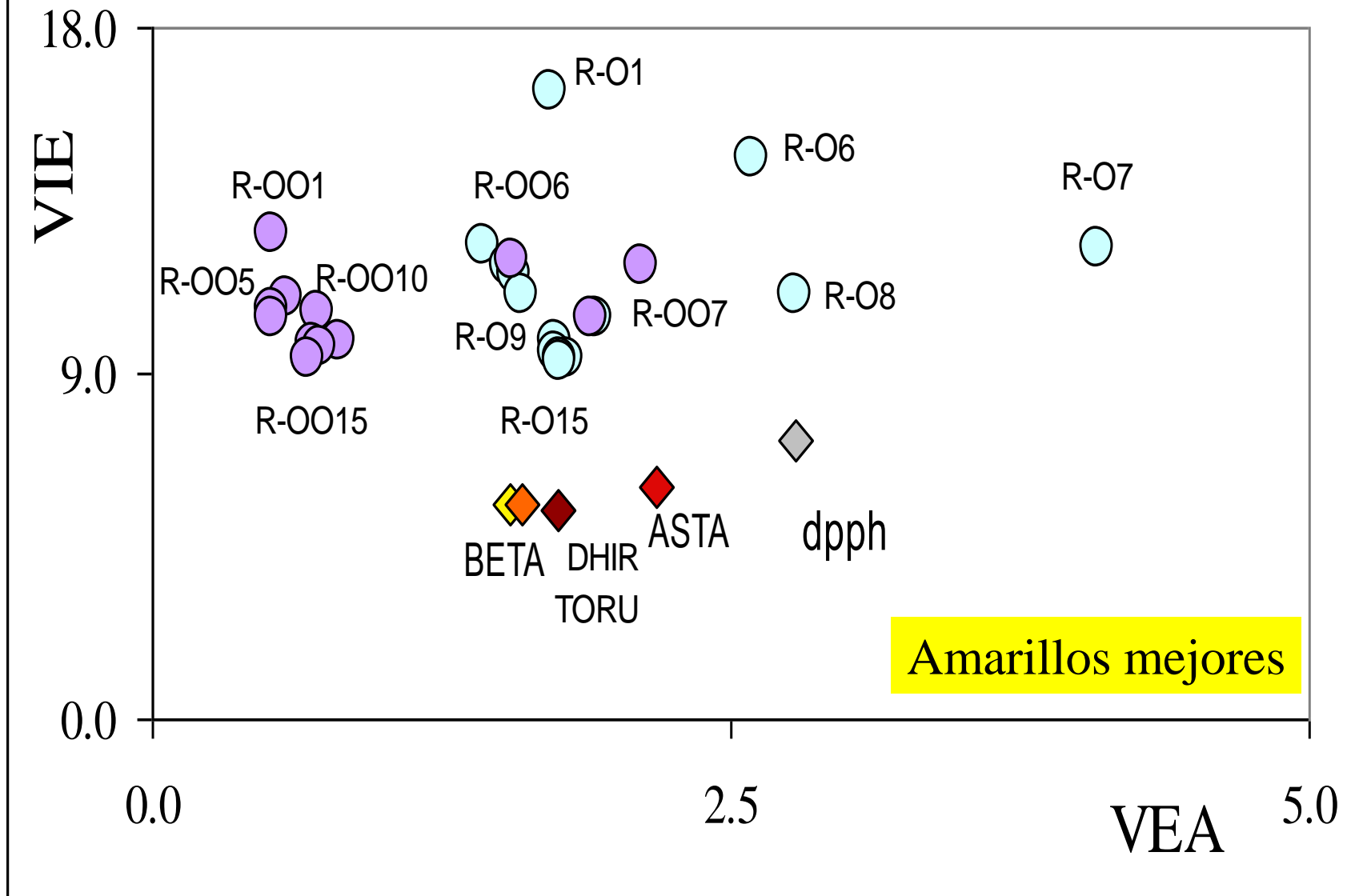
Amarillos mejores **DONADORES**

Rojos mejores **ACEPTORES**

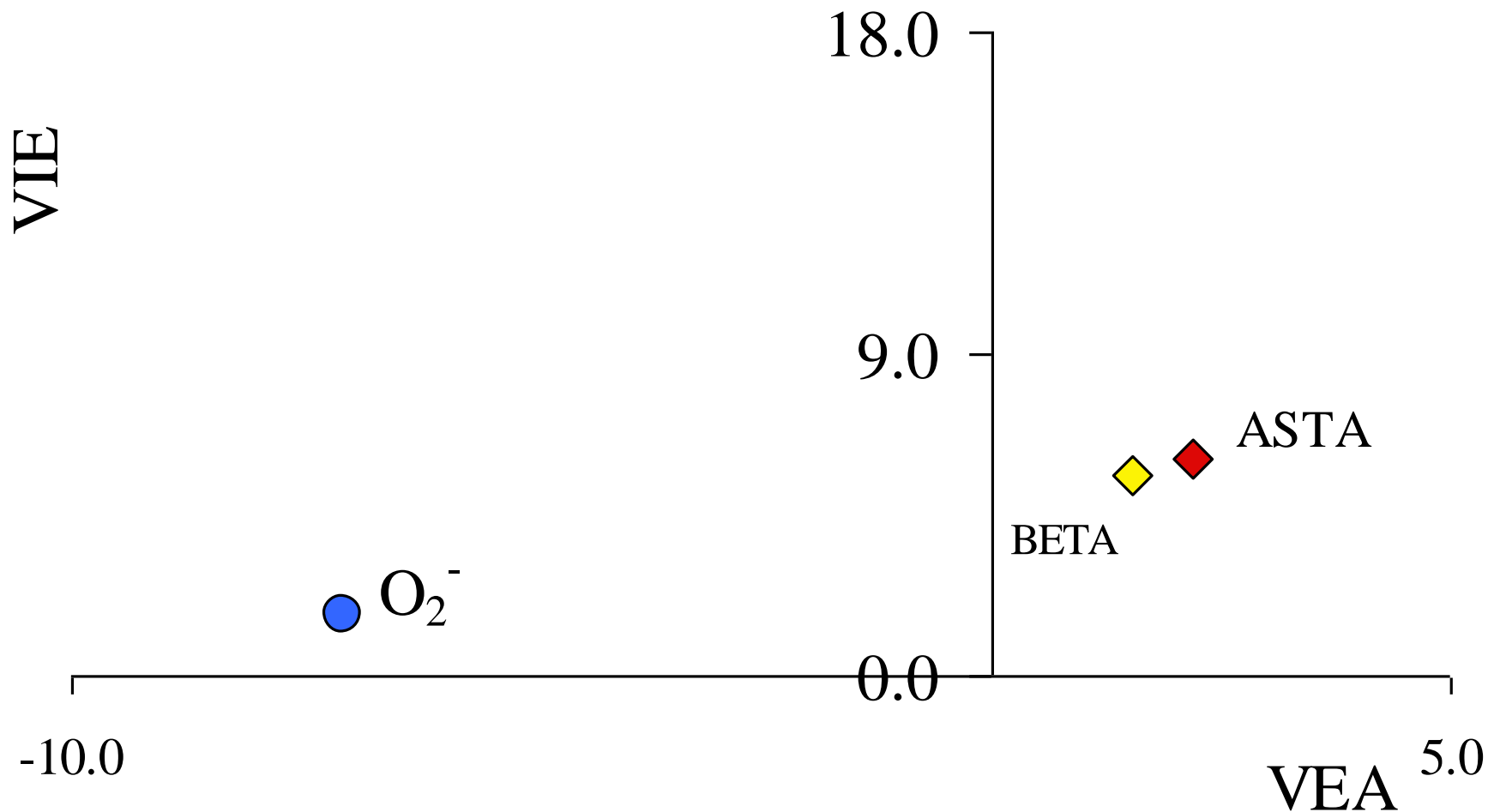
¿Donarle a quién?

¿Aceptar de quién?

# FEDAM



# FEDAM

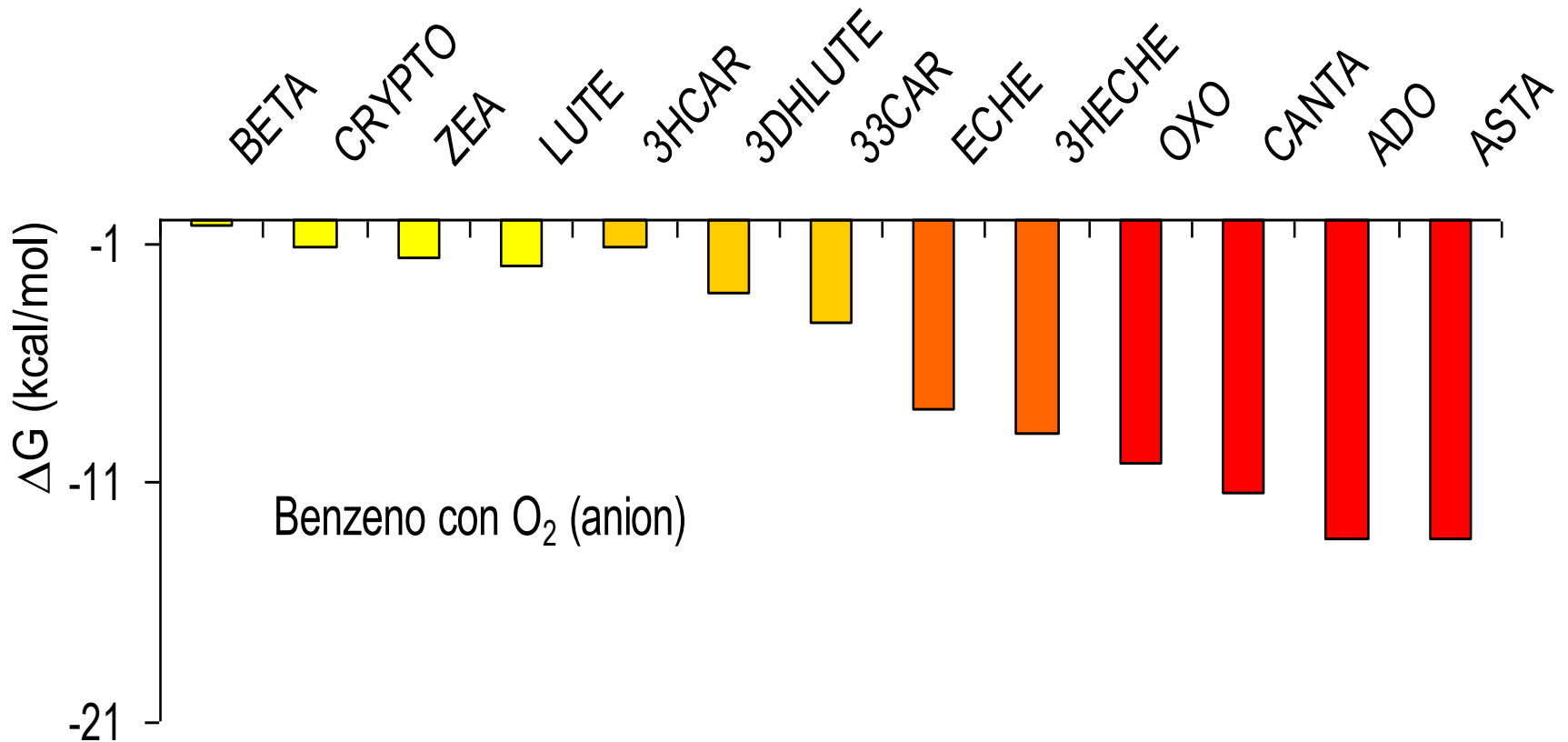


Annia Galano, Rubicelia Vargas, **Ana Martínez**  
Physical Chemistry Chemical Physics 12, 193-200 (2010)

¡Rojo mejor!

# Con $O_2^-$

rojos si pueden amarillos no



- Cálculo (estudio teórico) – ¿qué se puede y qué no?
  - Experimento – lo que se puede ... ¿se puede?
    - Implicaciones – ya que se pudo ¿ahora qué?

# ¿Qué se puede y qué no?

- Carotenos pueden donar y aceptar electrones
- Beta-caroteno NO puede reaccionar con  $O_2^-$  ni donando ni aceptando electrones
- **Astaxantina** SI puede reaccionar con  $O_2^-$  aceptando electrones

La capacidad de aceptar electrones explica,  
entre otras cosas ...

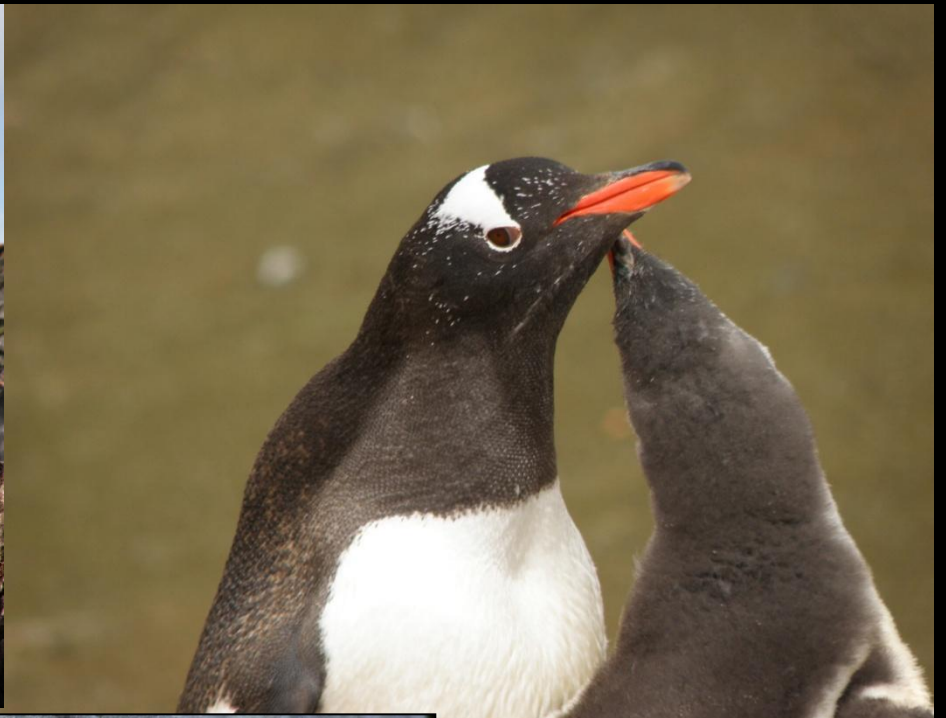
## Experimento cáncer-carotenos

Carotenos aceptan, es decir le quitan electrones a alguien, por ejemplo al DNA, es decir lo oxidan, es decir pueden “inducir” cáncer.

- Cálculo (estudio teórico) – ¿qué se puede y qué no?
  - Experimento – lo que se puede ... ¿se puede?
    - Implicaciones – ya que se pudo ¿ahora qué?

- Cálculo (estudio teórico) – ¿qué se puede y qué no?
- Experimento – lo que se puede ... ¿se puede?  
Hans-Richard Sliwka, *Eur. J. Org. Chem.* 2010, 4637–4641
- Implicaciones – ya que se pudo ¿ahora qué?

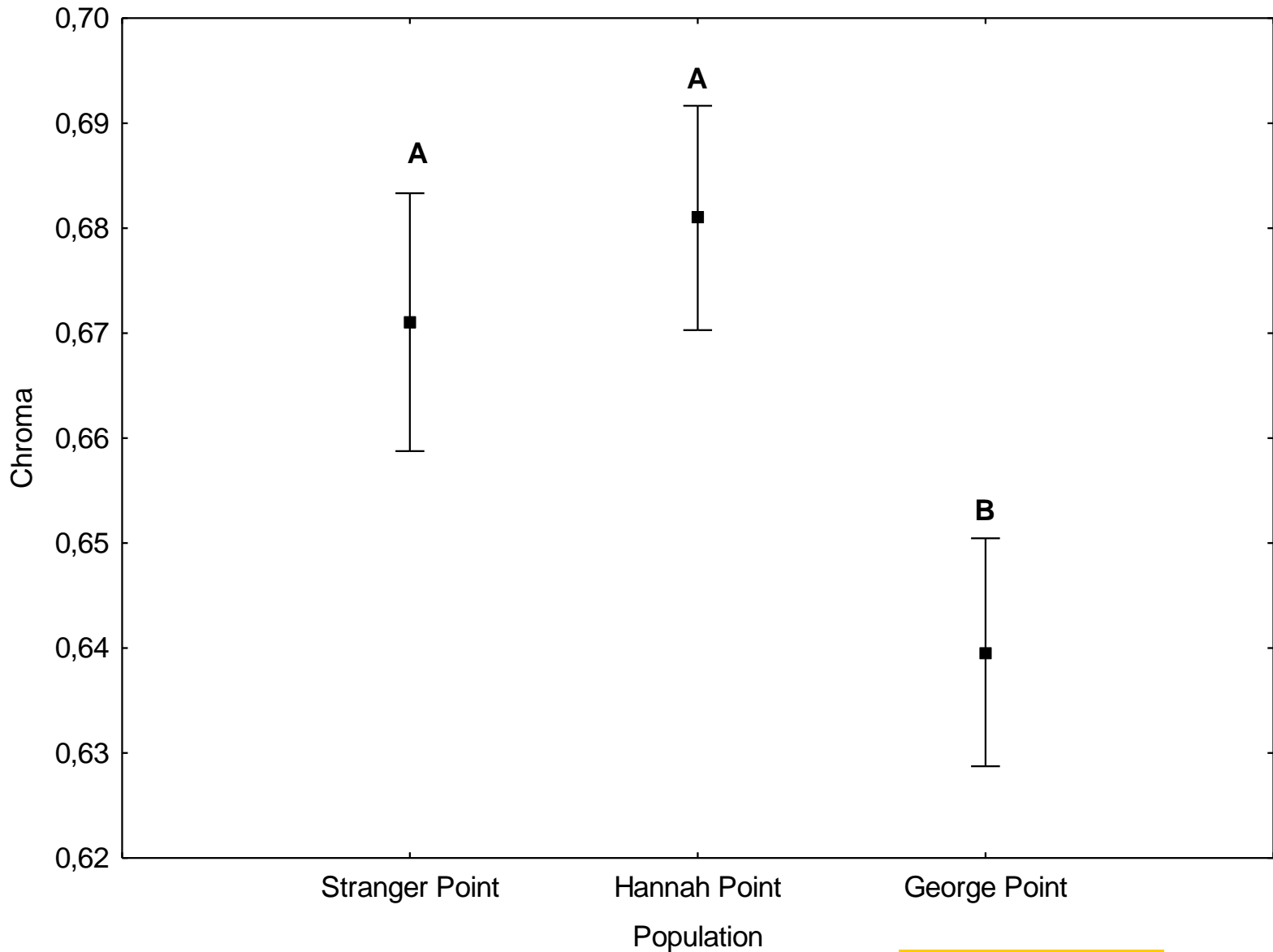




Delante

Detrás





**MÁS  
TURISMO**

**MENOS  
TURISMO**



# hipótesis de la cerveza



# DOS COSAS para recordar

- Carotenos pueden donar o **ACEPTAR** electrones para combatir radicales libres
  - Hipótesis de la cerveza

¡Muchas Gracias!

