

Estudios Recientes de Productos Naturales Iberoamericanos por RMN y DCV

Pedro Joseph-Nathan

Departamento de Química, Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del
Instituto Politécnico Nacional, Apartado 14-740, Mexico, DF, 07000 Mexico.

pjoseph@nathan.cinvestav.mx; www.nathan.cinvestav.mx

Durante los últimos cincuenta años, literalmente desde Marzo de 1962, he estado continuamente en contacto con espectrómetros de Resonancia Magnética Nuclear (RMN) y pocos cientos de mis publicaciones científicas incluyen usos muy diversos de esta metodología. Durante todo ese tiempo, de brinco en brinco, o sea de campo magnético en campo magnético, se han logrado desarrollar aplicaciones que fueron novedosas en su momento y que hicieron pequeños aportes al conocimiento de los productos naturales.

No pretendo hacer un relato histórico de todo aquello, pero sí deseo señalar que, desde los 60 MHz usados en 1962 a los 900 MHz que eventualmente he usado en alguna publicación aparecida el año pasado, ha sido posible resolver cada vez problemas más complejos.

Sin embargo la experiencia reciente enseña que hay moléculas relativamente sencillas, es decir productos naturales con pesos moleculares menores a 500 unidades de masa, cuya estructura y la configuración relativa de sus centros quirales no pueden ser caracterizadas totalmente por RMN. Por ello se ha tenido que recurrir al uso del dicroísmo circular vibracional (DCV) que es la técnica que en esos casos ha permitido la caracterización final. Por supuesto, el DCV ha proporcionado además la configuración absoluta de las moléculas estudiadas.

La RMN es actualmente una metodología bien conocida por los químicos orgánicos, mientras que el DCV no lo es tanto. Por ello, durante la presentación se hará una breve descripción de las bases y las limitaciones de esta metodología. Dicho lo anterior, como el título de la presentación lo indica, se mostrarán resultados recientes del uso combinado de RMN y DCV para la caracterización de moléculas, con lo que se puede establecer la estructura molecular y su configuración absoluta. Los cálculos usando teoría de funcionales de la densidad son los que han permitido complementar estos estudios en el caso del DCV y la iteración de espectros de RMN de hidrógeno usando cálculos con el programa PERCH en comparación al espectro experimental, han permitido hacer la asignación total de todos los átomos de hidrógeno de moléculas de la complejidad de sesquiterpenos, diterpenos y esteroides, con lo que se obtiene una buena aproximación al análisis conformacional de este tipo de productos naturales.

A fin de dejar información específica post-congreso, se podrán consultar los siguientes artículos que constituyen parte de la presentación que será efectuada durante el congreso:

- [1] **Stereochemical analysis of leubethanol, an anti-TB active serrulatane, from *Leucophyllum frutescens***, G.M. Molina-Salinas, V.M. Rivas-Galindo, S. Said-Fernández, D.C. Lankin, M.A. Muñoz, P. Joseph-Nathan, G.F. Pauli and N. Waksman, *J. Nat. Prod.*, **74**, 1842-1850 (2011).
- [2] **Chiral recognition of diastereomeric 6-cedrols by vibrational circular dichroism**, B. Gordillo-Román, J. Camacho-Ruíz, M. A. Bucio and P. Joseph-Nathan, *Chirality*, **24**, 147-154 (2012).

- [3] **Conformational analysis of perezone and dihydroperezone using vibrational circular dichroism**, E. Burgueño-Tapia, C.M. Cerda-García-Rojas and Pedro Joseph-Nathan, *Phytochem.*, **74**, 190-195 (2012).
- [4] **Synthesis and anti-HIV activity of lupane and olean-18-ene derivatives. Absolute configuration of 19,20-epoxylupanes by VCD**, F. Gutiérrez-Nicolás, B. Gordillo-Román, J.C. Oberti, A. Estevez-Braun, A.G. Ravelo and P. Joseph-Nathan, *J. Nat. Prod.*, **75**, 669-676 (2012).
- [5] **Absolute configuration and ^1H NMR characterization of rosmaridiphenol diacetate**, M. A. Muñoz, N. Pérez-Hernández, M. W. Pertino, G. Schmeda-Hirschmann and P. Joseph-Nathan, *J. Nat. Prod.*, **75**, 779-783 (2012).
- [6] **Absolute configuration and stereochemical analysis of 3 α ,6 β -dibenzoyloxypentane**, M.A. Muñoz, M. Martínez and P. Joseph-Nathan, *Phytochem. Lett.*, (en prensa).
- [7] **Determination of absolute configuration of salvic acid, an *ent*-labdane from *Eupatorium salvia*, by vibrational circular dichroism**, M.A. Muñoz, A. Urzúa, J. Echeverría, M.A. Bucio, A. Hernández-Barragán, and P. Joseph-Nathan, *Phytochem.*, (en prensa).
- [8] **Absolute configuration of the meroditerpenoids taondiol and epitaondiol diacetates by vibrational circular dichroism**, M.A. Muñoz, C. Areche, J. Roviroso, A. San Martín, B. Gordillo-Román, and P. Joseph-Nathan, *Heterocycles*, (en prensa).
- [9] **Structure and absolute configuration of a visamminol derivative using IR and vibrational circular dichroism**, E. Burgueño-Tapia, C. Ordaz-Pichardo, A.I. Buendía-Trujillo, F.J. Chargoy-Antonio, and P. Joseph-Nathan, (por enviar).