



## ASIGNACIÓN DE LA CONFIGURACIÓN ABSOLUTA DE CENTROS ESTEREOGÉNICOS EN COMPUESTOS ORGÁNICOS MEDIANTE CÁLCULOS DE QUÍMICA COMPUTACIONAL EN EL SALÓN DE CLASES

Alberto Aristeo Domínguez<sup>1</sup>, Ulises Israel Pérez Benítez<sup>1</sup>, Abdiel Ramírez Reyes<sup>1</sup>, Keops Xeki García Galván<sup>1</sup>, José Roberto Contreras Bárbara<sup>1</sup> y Oscar R. Suárez Castillo<sup>2</sup>

1 Tecnológico Nacional de México/Instituto Tecnológico de Atitalaquia, 2 Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo. aaristeo@itatitalaquia.edu.mx

Anteriormente la química computacional fué utilizada solo por expertos en química teórica, con el uso de herramientas que en su mayoría eran difíciles de comprender y aplicar. Hoy en día los avances en química computacional han producido programas que son fácilmente utilizados por cualquier químico. El entendimiento de la geometría molecular y la disposición espacial de los átomos o grupos alrededor de un centro estereogénico es de suma importancia debido a que la configuración absoluta determina importantes propiedades físicas, químicas y biológicas de compuestos orgánicos.

Suárez *et al.* llevaron a cabo el modelado molecular de diversos compuestos orgánicos mediante el análisis conformacional usando el método Montecarlo a nivel de mecánica molecular con el campo de fuerza MMFF94 implementado en el programa SPARTAN04. Desarrollando así una metodología eficiente confiable y reproducible para la asignación de la configuración absoluta en el carbono cuaternario estereogénico en C3 de diferentes derivados oxindólicos.

En este trabajo se proponen cálculos simples para las tareas de los estudiantes, debido a que en muchas ocasiones los alumnos no comprenden la disposición espacial de los centros estereogénicos mediante el uso del pizarrón de clases por tal motivo se necesita utilizar un software para el entendimiento de las geometrías moleculares. Los compuestos oxindólicos en los cuales se llevó a cabo el análisis conformacional sirvieron como ejemplo para el entendimiento de la geometría molecular y asignación de la configuración absoluta en el salón de clases.

La utilización total del software es difícil y requiere del dominio de diferentes aspectos de la química cuántica y computacional. Sin embargo, es posible su empleo para hacer cálculos sencillos con parámetros estándar que funcionan aceptablemente bien en la mayoría de los casos. Por ejemplo, una vez que el estudiante ha instalado el programa puede hacer modelados de los diferentes compuestos orgánicos quirales con importancia farmacéutica.