



# 5th International Symposium on Master Engineering *Booklets*



RENIECYT - LATINDEX - Research Gate - DULCINEA - CLASE - Sudoc - HISPANA - SHERPA UNIVERSIA - Google Scholar DOI - REDIB - Mendeley - DIALNET - ROAD - ORCID - V|LEX - EBSCO

## Title: Theoretical Characterization of Biotoxins Present in Marine Environments using Conceptual DFT

**Authors:** Rodríguez-Sánchez, Isis, Band-Schmidt, Christine Johanna Hernández-Guerrero, Claudia Judith, Quintana-Cano, Erika Teresa, Becerra-Martínez Elvia and Kantun-Uicab María Cristina

Editorial label MARVID: 607-8695

BMARVID Control Number: 2025-01

BMARVID Classification (2025): 021025-0001

Pages: 13

RNA: 03-2010-032610115700-14

### MARVID-México

Park Pedregal Business. 3580,  
Anillo Perif., San Jerónimo  
Aculco, Álvaro Obregón,  
01900 Ciudad de México, CDMX,  
Phone: +52 1 55 6159 2296  
Skype: MARVID-México S.C.  
E-mail: [contact@marvid.org](mailto:contact@marvid.org)  
Facebook: MARVID-México S. C.  
X: @Marvid\_México

[www.marvid.org](http://www.marvid.org)

### Holdings

Mexico	Colombia	Guatemala
Bolivia	Cameroon	Democratic
Spain	El Salvador	Republic
Ecuador	Taiwan	of Congo
Peru	Paraguay	Nicaragua

# Contenido

- Introducción
- Objetivo
- Materiales y Métodos
- Resultados
- Conclusiones

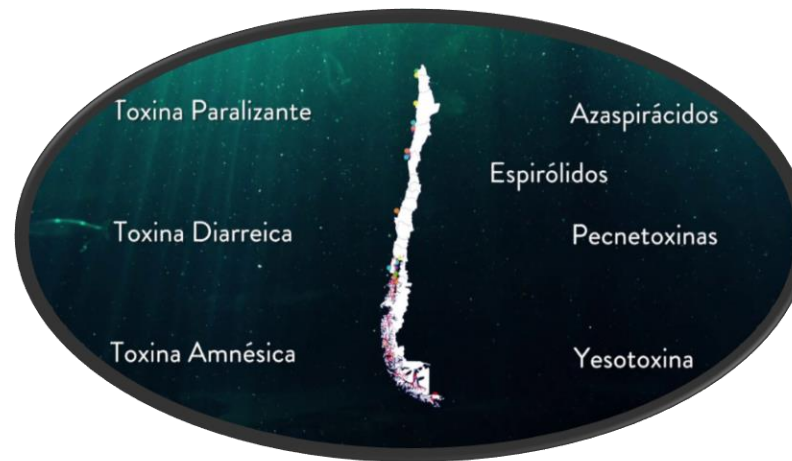


# Introducción

Las toxinas marinas son compuestos químicos producidos por microorganismos tales como los dinoflagelados, cianobacterias y algunas diatomeas que forman parte del fitoplancton.



Estas toxinas pueden causar graves efectos en la salud humana cuando se consumen productos del mar contaminados provocando afecciones como la parálisis por mariscos, intoxicación diarreica, neurotóxica o amnésica





Las pinatoxinas se definen como una clase de toxinas marinas, constituidas de anillos de carbociclos de 27 unidades producidas por microalgas dinoflageladas que se son responsables de la intoxicación y afectación a la salud humana a través del consumo de mariscos.



# Objetivo

El objetivo de esta investigación es determinar los sitios de reactividad química de mayor importancia que suceden entre en la biotoxina Pinatoxina G, a través de la Teoría de los Funcionales de la Densidad Conceptual utilizando los descriptores de reactividad química globales y locales. La finalidad de dicha evaluación es determinar un mecanismo para identificar los caminos de inmovilización reactiva de dichas toxinas a través de *docking molecular*.

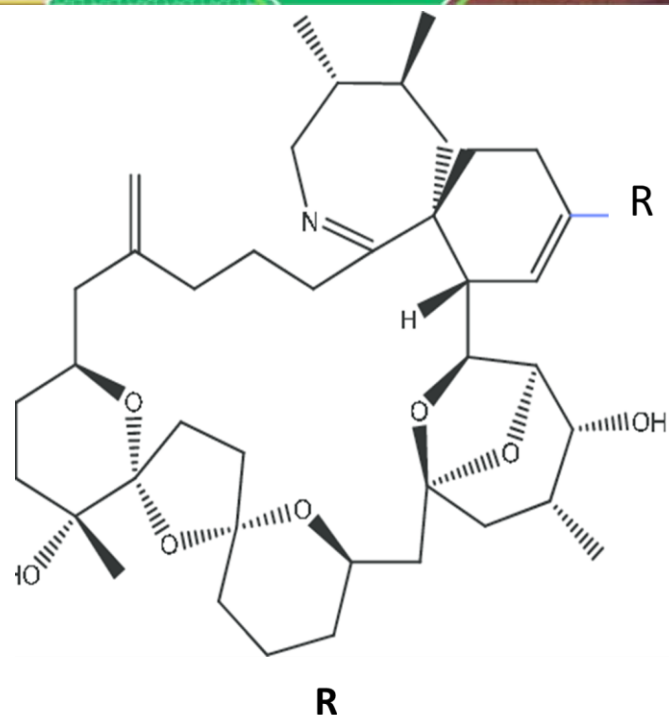


# Metodología

- Ruta de Cálculo: Teoría de los Funcionales de la Densidad, empleando el Funcional B3LYP y el nivel de teoría 631+\*\* con Gaussian 09<sup>®</sup>
- Evaluación de sitios de reactividad a través de los descriptores de reactividad local empleando DFT conceptual

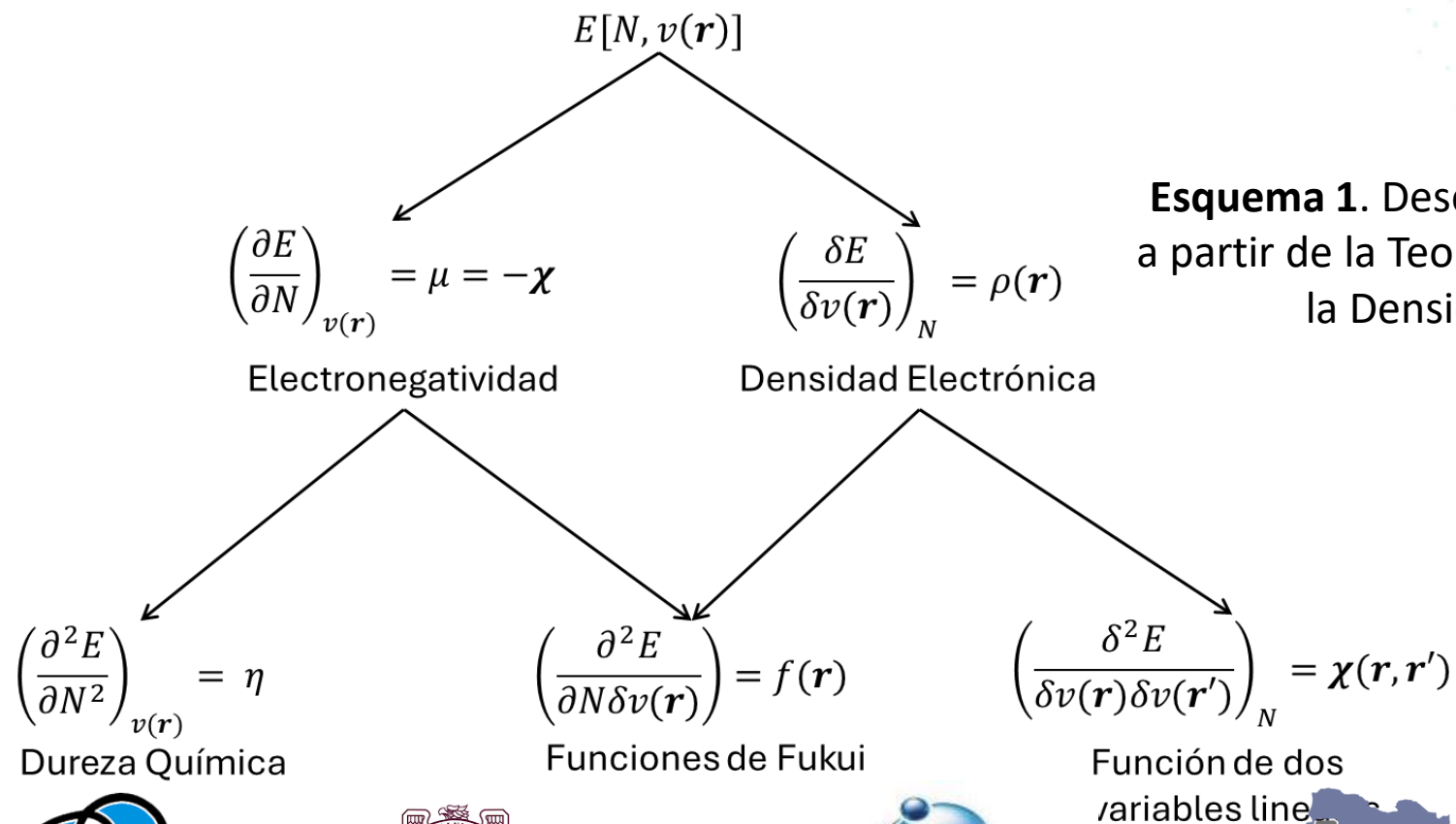


# Metodología



PTX -G: - CH<sub>2</sub>=CH<sub>2</sub>  
PTX -A: - CO<sub>2</sub>H

Imagen 1. Pinotoxina G



**Esquema 1.** Descriptores de Reactividad a partir de la Teoría de los Funcionales de la Densidad Conceptual

# Resultados

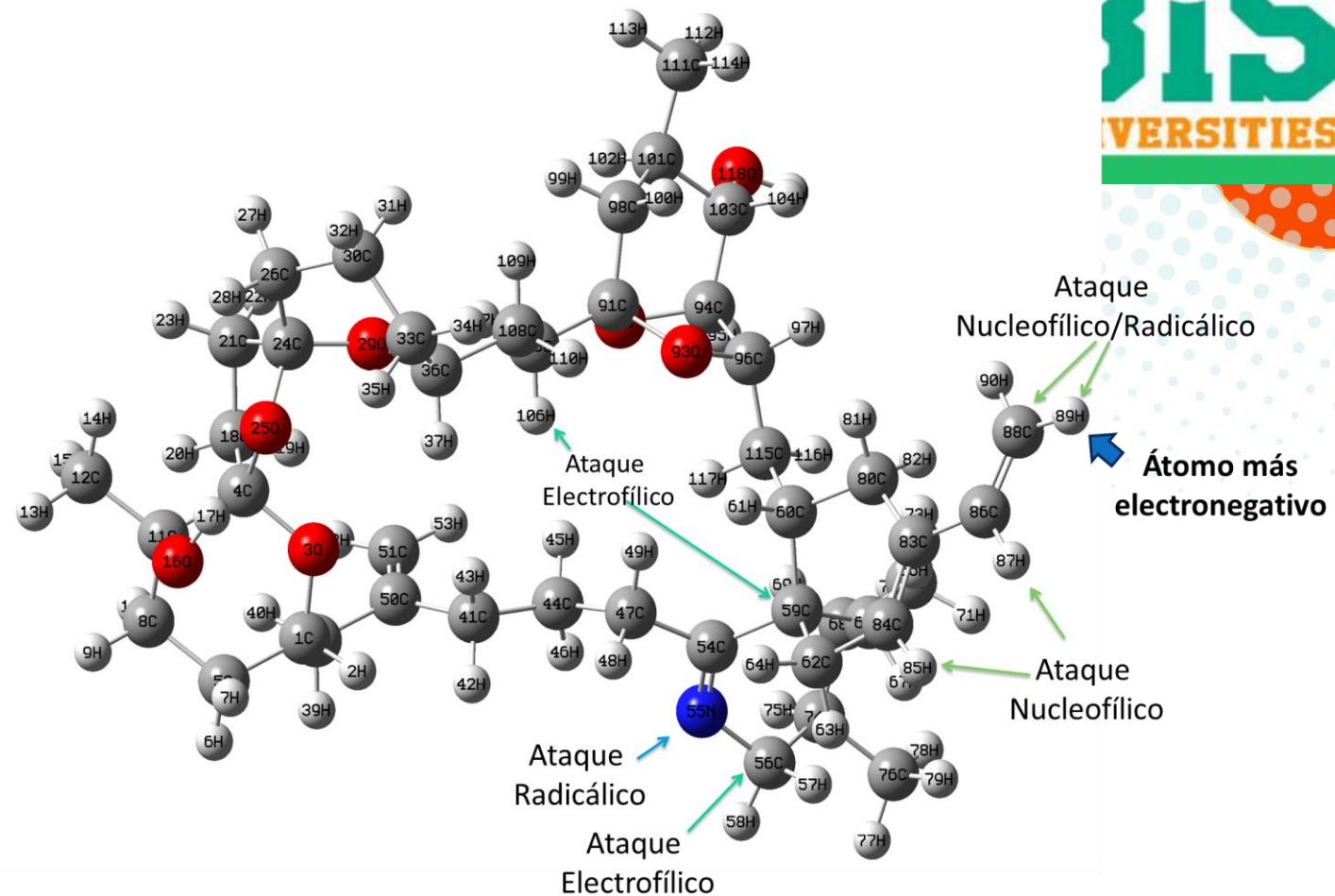


Imagen 2. Análisis de sitios de reactividad en Pinotoxina G

**Tabla 1.** Descriptores de Reactividad Local de la Pinatoxina G a partir de las Funciones de Fukui [5]

		Electronegatividad		Dureza		Blandura		Filicidad	
		Descriptor Dual		Descriptor Dual		Descriptor Dual		Descriptor Dual	
<b>Ataque Nucleofílico</b>									
87	H	0.007574	0.011555	0.020662	0.031520	0.227747	0.347427	0.000126	0.000192
88	C	0.007696	0.011684	0.020994	0.031871	0.231402	0.351302	0.000128	0.000194
85	H	0.007836	0.012572	0.021377	0.034296	0.235625	0.378025	0.000130	0.000209
89	H	<b>0.008899</b>	0.013924	<b>0.024276</b>	0.037982	<b>0.267584</b>	0.418662	<b>0.000148</b>	0.000232
<b>Ataque Electrofílico</b>									
		Descriptor Dual		Descriptor Dual		Descriptor Dual		Descriptor Dual	
59	C	0.001747	-0.003147	0.004765	-0.008585	0.052523	-0.094627	0.000029	-0.000052
47	C	0.001931	-0.003964	0.005268	-0.010814	0.058071	-0.119196	0.000032	-0.000066
56	C	0.002453	<b>-0.005165</b>	0.006690	<b>-0.014090</b>	0.073744	<b>-0.155311</b>	0.000041	<b>-0.000086</b>
<b>106</b>	H	<b>0.002467</b>	-0.004327	<b>0.006730</b>	-0.011804	<b>0.074179</b>	-0.130115	<b>0.000041</b>	-0.000072
<b>Ataque Radicálico</b>									
		Descriptor Dual		Descriptor Dual		Descriptor Dual		Descriptor Dual	
88	C	0.005842	0.011684	0.015936	0.031871	0.175651	0.351302	0.000097	0.000194
85	H	0.006286	0.012572	0.017148	0.034296	0.189012	0.378025	0.000105	0.000209
55	N	0.006553	0.013106	0.017875	0.035750	0.197027	0.394054	0.000109	0.000218
<b>89</b>	H	<b>0.006962</b>	<b>0.013924</b>	<b>0.018991</b>	<b>0.037982</b>	<b>0.209331</b>	<b>0.418662</b>	<b>0.000116</b>	<b>0.000232</b>



## Conclusión

El análisis de los sitios de reactividad de la Pinatoxina G a través de las Funciones de Fukui Condensadas de la Teoría de los Funcionales de la Densidad Conceptual permite identificar las zonas de mayor probabilidad a experimentar una ruptura o donde es posible sustituir el arreglo químico con la finalidad de modificar su comportamiento reactivo e inducir el control de la biotoxina para lograr su control en ambientes marinos. Esto sucede en el hidrógeno 89 ya que se encuentra carente de densidad electrónica por lo que predomina el ataque de especies nucleófilas.





# Agradecimientos

Se externa el agradecimiento a la Secretaria de Investigación y Posgrado del Instituto Politécnico Nacional a través del proyecto aprobado **SIP20254109** por el apoyo otorgado.



# Referencias

- [1]. Gómez, A. M., & Vélez, M. (2020). El monitoreo de toxinas marinas: Métodos y aplicaciones en la pesca sostenible. *Revista Latinoamericana de Oceanografía*, 45(2), 78-90.
- [2]. Hernández, L., & Guzmán, M. (2018). Efectos de las toxinas marinas en la fauna marina y su implicación en la seguridad alimentaria. *Revista de Ciencias Ambientales*, 9(1), 33-45.
- [3]. Nakamura, S., Kikuchi, F., & Hashimoto, S. (2008) Stereoselective synthesis of a C1–C6 fragment of pinnatoxin A via a 1,4–addition/alkylation sequence. *Tetrahedron: Asymmetry* 19, 1059–1067.
- [4]. Durán-Riveroll, L. M., Cembella, A. D., Band-Schmidt, C.J., Bustillos-Guzmán, J.J., & Correa-Basurto, J. (2016). Docking Simulation of the Binding Interactions of Saxitoxin Analogs Produced by the Marine Dinoflagellate *Gymnodinium catenatum* to the Voltage – Gated Sodium Channel Na<sub>v</sub>1.4. *Toxins* 6, 129.
- [5]. Domingo, L. R., Ríos-Guitérrez, M., & Pérez, P. (2016) Applications of the Conceptual Density Functional Theory Indices to Organic Chemistry Reactivity. *Macromolecules* 21, 748.



**MARVID®**

© MARVID-Mexico

No part of this document covered by the Federal Copyright Law may be reproduced, transmitted or used in any form or medium, whether graphic, electronic or mechanical, including but not limited to the following: Citations in articles and comments Bibliographical, compilation of radio or electronic journalistic data. For the effects of articles 13, 162, 163 fraction I, 164 fraction I, 168, 169, 209 fraction III and other relative of the Federal Law of Copyright. Violations: Be forced to prosecute under Mexican copyright law. The use of general descriptive names, registered names, trademarks, in this publication do not imply, uniformly in the absence of a specific statement, that such names are exempt from the relevant protector in laws and regulations of Mexico and therefore free for General use of the international scientific community. BMARVID is part of the media of MARVID-Mexico., E: 94-443.F: 008- ([www.marvid.org/booklets](http://www.marvid.org/booklets))