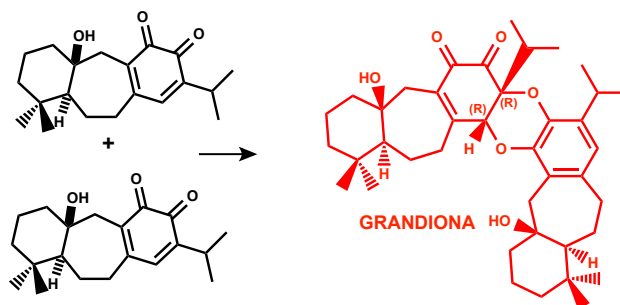


## ESTUDIO DE LA ESTEREO Y REGIOSELECTIVIDAD EN LA SÍNTESIS BIOMIMÉTICA DEL DÍMERO DE DITERPENO HEPTACÍCLICO, GRANDIONA.

Carolina Stephanía Castro Segura<sup>1</sup>, Gonzalo Joaquín Mena Rejón<sup>2</sup>, Ramiro Felipe Quijano Quiñones<sup>1</sup>.

<sup>1</sup>Laboratorio de Química Teórica, <sup>2</sup>Laboratorio de Química Farmacéutica.  
Facultad de Química, Universidad Autónoma de Yucatán, México.  
e-mail: stephania.castro.segura@gmail.com

La grandiona, un dímero de diterpeno heptacíclico se aisló en 1999<sup>1</sup> y en 2005<sup>2</sup> se llevó a cabo la primera biosíntesis del compuesto. La reacción de síntesis consistió en la oxidación de los monómeros y su consiguiente dimerización; al utilizar diversos solventes apolares no se obtuvo el producto, sin embargo en estado sólido, es decir, calentando el crudo de reacción sin solvente se obtuvo la grandiona con un rendimiento del 82%. A partir de los resultados, Aoyagi y colaboradores<sup>2</sup> proponen que la grandiona se obtiene a partir de una reacción de hetero Diels-Alder altamente regio y estereoselectiva. Sin embargo no se ha realizado algún trabajo teórico que colabore en el estudio de dicho mecanismo. Por tanto, se estudió a través de un enfoque computacional, la síntesis biomimética realizada por Aoyagi *et al.*<sup>2</sup> para la formación de la grandiona y de los isómeros correspondientes. Los cálculos se realizaron utilizando la Teoría del Funcional de la Densidad y el método de cálculo M06-2X/6-31G(d,p). Se optimizaron las geometrías de los reactivos y productos, así como la de los estados de transición (ET) y se llevó a cabo un análisis de la transferencia de carga y la asincronía, además de las energías de reacción y activación, donde la grandiona resultó la preferida cinéticamente. Los resultados indican que la grandiona se produce a través de una reacción por pasos y se propone un mecanismo factible para su formación.



(1)Galli, B.; *et al. Tetrahedron* **1999**, 55, 11385-11394.

(2)Aoyagi, Y.; *et al. Tetrahedron Letters* **2005**, 46, 7885-7887.