

Seminario de Química Orgánica

Miércoles 30 de noviembre de 2022, 13 h

AULA VIRTUAL DQO: <https://zoom.us/my/qo.aula01> - Clave: exactas20

AULA SEMINARIO DQO - 3° piso - PAB. II - CIUDAD UNIVERSITARIA

“Espectrometría de Masa para el análisis de Productos Naturales. Metabolómica fúngica, prospección e interacción con metales divalentes”

Dr. Gastón E. Siless

Departamento de Química Orgánica – UMYMFOR – CONICET

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales – UBA

La Espectrometría de Masa como disciplina ha resultado desde siempre una herramienta invaluable para los químicos de Productos Naturales, tanto por su utilidad para la caracterización estructural de compuestos como por su capacidad para la identificación y cuantificación de sustancias en mezclas complejas con gran sensibilidad.

En el presente seminario se expondrán distintos ejemplos en los cuales se empleó la Espectrometría de Masa como herramienta clave para el análisis de Productos Naturales de origen fúngico y vegetal. Por ejemplo, se evaluó el perfil metabólico en cultivos del hongo endófito *Drechslera sp.*, para el cual se evaluó el uso de inhibidores de histonas deacetilasas (HDACs) como modificadores epigenéticos a fin de potenciar la producción de metabolitos secundarios. Para evaluar el desempeño de la cepa en las distintas condiciones de cultivo se analizaron los correspondientes extractos mediante LC-EM, obteniendo un set de datos. Utilizando herramientas de análisis multivariado de datos se pudieron detectar las diferencias y similitudes, lo que permitió optimizar las condiciones de cultivo para aislar varias familias de metabolitos secundarios estructuralmente diversos con actividad antifúngica frente a hongos fitopatógenos. Adicionalmente, se analizó el desempeño de cada HDAC mediante la distribución de los mismos en medio/micelio y la detección de productos de biotransformación. En esta misma línea de trabajo, se detallarán los resultados más recientes de los metabolitos secundarios producidos por el hongo extremófilo *Emericellopsis sp.* que poseen la capacidad de interactuar con ciertos cationes divalentes, lo cual puede dar pautas para la tolerancia que presenta esta especie a las condiciones de alta salinidad en su hábitat natural.

Finalmente se desarrollará el empleo de Espectrometría de Masa utilizando Electrospray como fuente de ionización para la caracterización de la interacción de metabolitos con cationes divalentes de metales y el empleo de modelado molecular *in silico* de los aductos observados en el EM, lo que permite racionalizar el perfil de aductos observado y la estabilidad relativa de los mismos para varias familias de productos naturales.