



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MEXICO

PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN CIENCIAS QUÍMICAS

MODELADO MOLECULAR DE LA INTERACCIÓN DE LA L Y D ALANINA EN
OLIVINA: UN MODELO DE QUÍMICA PREBIÓTICA BASADO EN LAS
CARACTERÍSTICAS DE LA METEORITA ALLENDE

PROYECTO DE INVESTIGACIÓN

PARA OPTAR POR EL GRADO DE

MAESTRO EN CIENCIAS

PRESENTA

Q. DANIEL LUNA LAVIADA

Dr. ALEJANDRO HEREDIA BARBERO
INSTITUTO DE CIENCIAS NUCLEARES, UNAM

CIUDAD UNIVERSITARIA, CDMX, AGOSTO 2021



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN CIENCIAS QUÍMICAS

MODELADO MOLECULAR DE LA INTERACCIÓN DE LA L Y D ALANINA EN
OLIVINA: UN MODELO DE QUÍMICA PREBIÓTICA BASADO EN LAS
CARACTERÍSTICAS DE LA METEORITA ALLENDE

PROYECTO DE INVESTIGACIÓN

PARA OPTAR POR EL GRADO DE

MAESTRO EN CIENCIAS

PRESENTA

Q. DANIEL LUNA LAVIADA

Dr. ALEJANDRO HEREDIA BARBERO
INSTITUTO DE CIENCIAS NUCLEARES, UNAM



Contenido

I. Índice de figuras	III
II. Índice de tablas	IV
V. Agradecimientos	V
1. Introducción	1
2. Justificación del proyecto	4
3. Objetivos	4
3.1. Objetivo General	4
3.2. Objetivos particulares	4
4. Hipótesis	5
5. Metodología	5
6. Resultados del proyecto	8
6.1. Caracterización Espectroscópica	8
6.1.1. Análisis mineralógico mediante FTIR	8
6.1.2. Análisis estructural mediante difracción de rayos X.	9
6.3.1. Microscopía de Fuerza atómica	10
6.4. Dinámicas moleculares	13
7. Conclusiones del proyecto	14
8. Balance General del Proyecto	19
9. Perspectivas para futuros proyectos	19
10. Referencias	21
11. Anexo I	23
i. Reuniones y simposios	25

I. Índice de figuras

FIGURA 1	1
FIGURA 2	2
FIGURA 3	4
FIGURA 4	7
FIGURA 5	8
FIGURA 6	8
FIGURA 7	9
FIGURA 8	10
FIGURA 9	10
FIGURA 10	11
FIGURA 11	11
FIGURA 12	12
FIGURA 13	12
FIGURA 14	13
FIGURA 15	13
FIGURA 16	14
FIGURA 17	15
FIGURA 18	15
FIGURA 19	16
FIGURA 20	17

II. Índice de tablas

Tabla 1.	8
Tabla 2.	15
Tabla 3	17

IV. Glosario de acrónimos

1. Meteroita Allende MA.
2. Microscopia de Fuerza Atómica. MFA.
3. Espectroscopia Infrarroja de reflexión total atenuadaATR-FTIR.
4. Difracción de Rayos X DRX.
5. Espectroscopía de Dispersión de Rayos X EDS.
6. Microscopía de Fuerza Magnética..... MFM.
7. Molecular Mechanics + MM+
8. Parametric Method 3PM3.

V. Agradecimientos

Este trabajo fue realizado en el Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM.

Se agradece al Programa de Posgrado en Ciencias Químicas, UNAM.

Se agradece el apoyo de los proyectos PAPIIT IN210119 e IN22681.

Se agradece al Dr. Alejandro Heredia Barbero por su guía y tutela a lo largo de este proyecto. Se agradece a la Q.F.B. Claudia Consuelo Camargo Raya, al M. en C. Benjamín Leal Acevedo, al Tec. Francisco García Flores, a la Prof. Isabel Mejía Luna, al M. en C. Luciano Díaz González, al Sr. Martín Cruz Villafañe, al Sr. Luis Miguel Valdez Pérez, al Ing. Juan Eduardo Murrieta León, al Mat. Enrique Palacios Boneta, al Sr. Antonio Ramírez Fernández, al Tec. Acad. José Rangel, pertenecientes al personal del Instituto de Ciencias Nucleares, por apoyar al estudiante a realizar dicho proyecto.

Se agradece a la Dra. Karina Elizabeth Cervantes de la Cruz, a la Dra. Alicia Negrón Mendoza, al Dr. Sergio Ramos Bernal, al Dr. Víctor Hugo Meza Laguna, al Dr. Vladimir Basiuk, al Dr. Emilio Bucio Carrillo, al Dr. José Federico del Río Portilla, al Dr. Lauro Bucio Galindo, la Dra. Rosales Chávez y al Dr. Lauro Bucio, por el gran apoyo para el proyecto.

Se agradece al Instituto de Geología, UNAM, especialmente a LABGEN por las facilidades en la obtención en patrones de difracción de rayos X, así como en la obtención de imágenes de microscopía electrónica de barrido. Gracias especiales a la Dra. Teresa Pi Puig, a la Dra. Adela Margarita Reyes Salas y a la Q. Sonia Ángeles García, por su apoyo en el uso de estos equipos.

1. Introducción

A lo largo de los años se han estudiado los compuestos orgánicos que se encontraron en los cuerpos celestes caídos en la Tierra, especialmente las meteoritas del tipo de condritas carbonosas. Las meteoritas son fragmentos de asteroides generadas por las colisiones de asteroides. Generalmente, se desprenden de los asteroides, mismos que orbitan el Cinturón entre Marte y Júpiter, y viajan a través del espacio interestelar hasta impactar contra otro tipo de cuerpos celestes como superficies planetarias o satélites naturales (Bischoff, 2001).

En particular, se han estudiado las meteoritas que impactaron la Tierra o la Luna. Estas viajeras, nos proporcionan mucha información sobre el origen de los planetas, ya que se formaron en conjunto, en los discos protoplanetarios.

Las meteoritas, también conocidos como meteoritos, se clasifican en dos grandes grupos: las diferenciadas y las no diferenciadas.

El grupo de las diferenciadas incluye las condritas, mientras que el grupo de no diferenciadas contienen: acondritas, metálicas y pétreas, según la clasificación propuesta por Bischoff en el 2001 (figura 1).

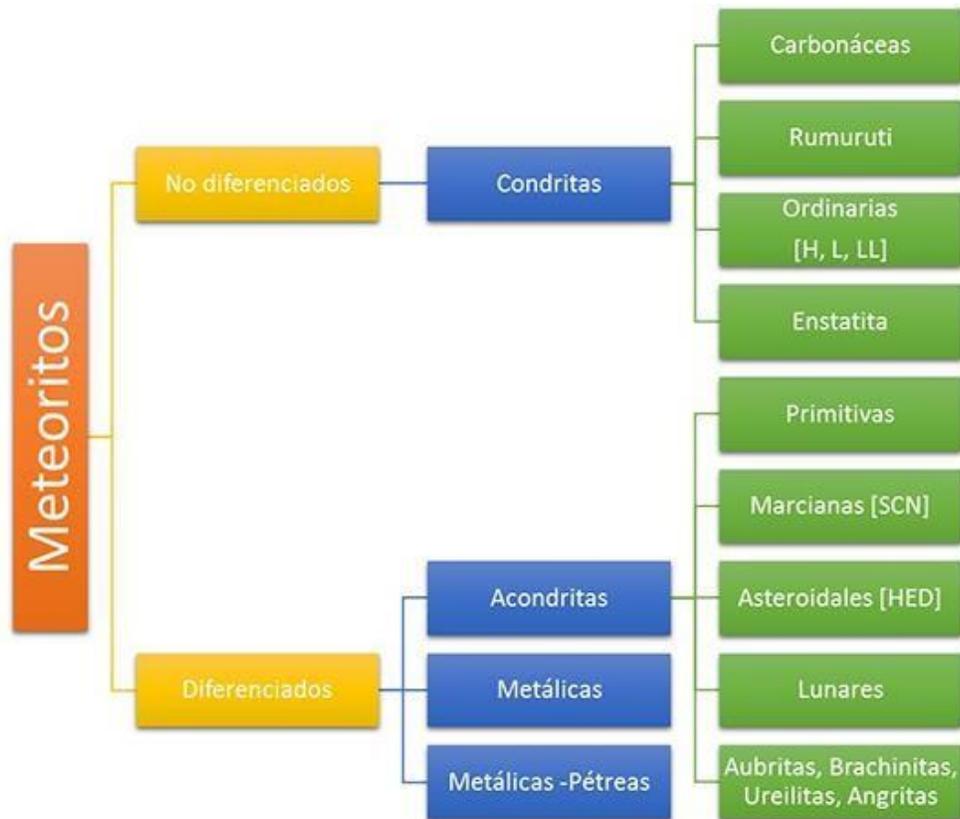


Figura 1 Clasificación de meteoritos propuesta en 2001 (Bischoff, 2001)

Para estudiarlas, pueden nombrarse a las meteoritas según su lugar de descubrimiento o bien donde éstas impactan. Y se ha acordado que las meteoritas pueden nombrarse:

- a) En el momento en el cual impactan acuñando el término “caída”
- b) En caso que se desconozca la fecha de impacto, se le nombra “hallazgo”(Bischoff, 2001; Clarke et al., 1971; Solé, 2015).

La meteorita conocida más antigua impactó el 9 de febrero de 1969. La caída ocurrió cerca de la ciudad Allende, Chihuahua (figura 2), tomando el nombre del dicha ciudad (Clarke et al., 1971; Jarosewich et al., 1987).

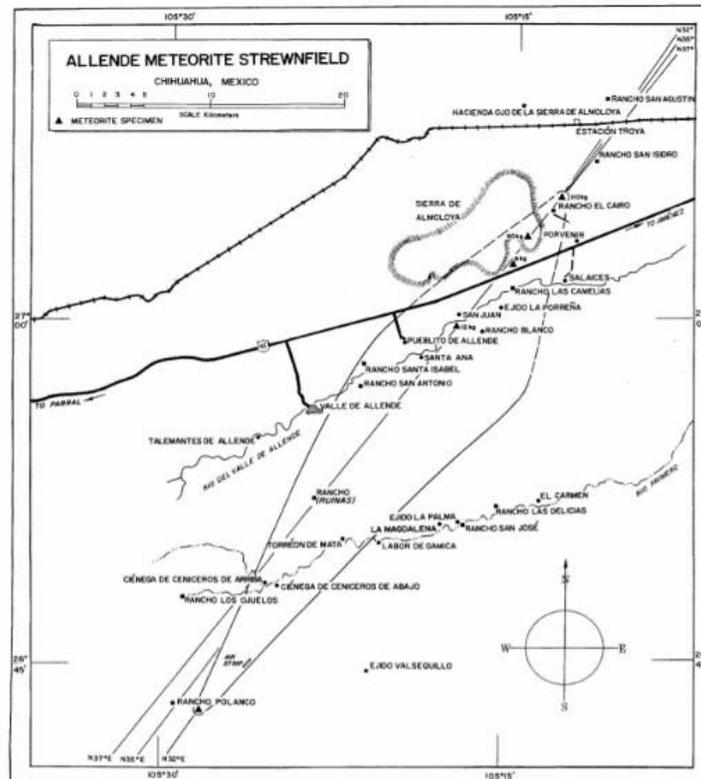


Figura 2 Croquis de la extensión del impacto de la meteorita del pueblo de Allende, Chihuahua(1969) (Clarke et al., 1971; Jarosewich et al., 1987) .

Desde 1969, se han recuperado cerca de 2 toneladas de material mineralógico de este espécimen.

Con el fin de esclarecer la composición de la meteorita, en este proyecto analizó dos aspectos:

- a) el análisis mineralógico mediante diversas técnicas microscópicas y espectroscópicas
- b) el comportamiento de algunos compuestos orgánicos contenidos en ella, así como la posibilidad de autoensamblamiento y formación de estructuras cristalinas plausibles, que pudieron promover enlaces peptídicos.

En los trabajos de Clarke de 1971 sobre la composición de la meteorita *Allende* (MA) se encontraron diversas fases minerales. Destacaron minerales compuestos de silicio, magnesio,

hierro, aluminio, azufre y níquel, como el *olivino* en la fase mineral de *forsterita*, olivino con trazas de cobalto y níquel, la troelita y los cúmulos de enstatita y diópsidos. (Jarosewich et al., 1987).

Además de las fases minerales descritas anteriormente, cabe recalcar que durante las largas travesías de la meteorita, se alcanzaron a formar aminoácidos. Sabemos que éstos no son productos de contaminación del impacto, puesto que se encontraron mezclas de enantiómeros de dichos compuestos orgánicos. En otros artículos se han reportado mezclas enantioméricas particulares de los aminoácidos y abundancias isotópicas diferentes a las publicadas en la Tierra (Cronin y Moore, 1971; Csapé *et al.*, 1994; Glavin *et al.*, 2020).

En este trabajo se proponen sistemas de interacciones de fases minerales con aminoácidos, con base en que se encontraron compuestos orgánicos de esta índole en las meteoritas, y más específicamente en la meteorita Allende, encontrando las condiciones mineralógicas que presenta una muestra de esta meteorita, y simulando computacionalmente los posibles comportamientos que tiene el aminoácido alanina y evaluando los atributos que le comparte la quiralidad de este aminoácido.

2. Justificación del proyecto

Este proyecto se realizó por el interés del probable comportamiento químico de los aminoácidos quirales bajo las condiciones químicas que posiblemente tenía la Tierra primitiva, y que posteriormente, con ayuda de interacciones con fases minerales y radiación ionizante pudieron formar biomoléculas orgánicas más complejas como péptidos, terpenos o carbohidratos.

3. Objetivos

3.1. Objetivo General

El objetivo general del proyecto fue encontrar y simular las posibles condiciones que permitirían un posible autoensamblaje de moléculas de alanina y ver que comportamiento quiral que tiene este compuesto para la posible formación de cristales, en base de las condiciones fisicoquímicas y mineralógicas encontradas en la meteorita Allende.

3.2. Objetivos particulares

- I. Caracterización cristalográfica, fisicoquímica y micrográfica de una muestra de meteorita Allende, empleando las técnicas de:
 - Difracción de rayos X en polvo (DRX).
 - Espectroscopía infrarroja de los minerales empleando ATR-FTIR
 - Microscopía electrónica de barrido (SEM) y espectroscopia de dispersión de rayos X generados (EDS)
 - Microscopía de fuerza atómica (MAF).
 - Microscopia de fuerza magnética (MFM).
- II. Descripción de la topología y morfología de la composición más abundante en la muestra, mediante las microscopias mencionadas anteriormente.
- III. Simulación computacional mediante dinámica molecular de las interacciones entre mezclas enantiomérica de alanina y los minerales más abundantes de la matriz de la meteorita.

4. Hipótesis

Si los minerales tipo olivina y los metálicos de NiFe son fases principales en el sistema solar, entonces es posible que coadyuvaran en la preservación fisicoquímica preferencial de aminoácidos en meteoritas del tipo Allende promoviendo autoensamblaje y su autocatálisis.

5. Metodología

Se analizó una muestra de meteorita Allende tratada anteriormente: pulida acabado espejo, montada en un portaobjetos de 12 x 5 cm, muestra desequilibrada en clinostatitas.

Para facilitar el análisis de la muestra, se dividió la muestra en 12 columnas denotadas con números y en 9 filas caracterizadas con letras, (figura 3).

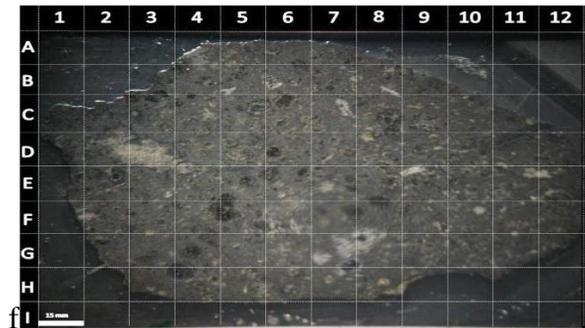


Figura 3 División de la Muestra de meteorita, en 108 sectores de 15 x 10 mm.

- 1- Caracterizar estructural, fisicoquímica y morfológicamente una muestra pulida espejo de la meteorita Allende y comprobar de la presencia de moléculas orgánicas sencillas.
- 2- Evaluar la composición mineralógica presente en la mayoría de la matriz de la muestra, mediante las técnicas de ATR-FTIR, difracción de rayos X y espectroscopía de dispersión de RX.
- 3- Establecer las posibles condiciones fisicoquímicas en las cuales las alaninas pudieron estabilizarse en los minerales y hacer observaciones con microscopía de luz en las diversas áreas de la muestra. En particular, estudiar las propiedades magnéticas mediante MFM.
- 4- Simular las condiciones en las cuales las moléculas de alanina pudieron interactuar con los minerales de este cuerpo celeste, empleando métodos de dinámica estadística, mapas de interacciones electrostáticas y las posibles vías de nucleación de los cristales de alanina que pudieron haber adoptado al estabilizarse en la meteorita Allende.

5.1. Caracterización Espectroscópica

5.1.1. Análisis mineralógico mediante FTIR

Para realizar este análisis se empleó un equipo ATR-FTIR, marca Perkin Elmer, modelo: Spectrum® 100, para ello se hicieron 10 corridas de 32 escaneos cada una, manteniendo el indicador de presión a 101 unidades arbitrarias del equipo; los barridos se realizaron de 4000 cm^{-1} a 600 cm^{-1} a los 108 sectores de la muestra, sin embargo, se encontró que el sector G6 (figura 3), es un sector representativo de toda la muestra, por lo cual, a partir de este momento únicamente se utilizó este sector para los demás análisis, además, para poder realizar la toma de muestra, se usó como blanco resina de poliamida con la que se recubrió la muestra, y se decidió hacer por triplicado el experimento.

5.1.2. Análisis estructural mediante difracción de rayos X de polvos de la meteorita Allende

Este análisis se realizó en el Laboratorio de Difracción de rayos X del Instituto de Geología, UNAM. La muestra se postró en un portamuestras de acero como roca total. La medición se realizó en el intervalo angular 2θ de 5° a 80° con un “step scan” de 0.003° (2 Theta) y un tiempo de integración de 40 s por paso, con tiempo a completar 16 h. El difractograma se obtuvo en un Difractómetro EMPYREAN equipado con filtro de Ni, tubo de cobre de foco fino, monocromador y detector PIXcel3D. Para realizar la identificación de fases se realizó mediante el software de Crystal Impact Match! ® (K. y GbR, 2019).

5.2. Caracterización microscópica de la muestra de meteorita Allende

5.2.1. Microscopía de transmisión de luz polarizada

Se empleó un microscopio Motic 210 con cámara Motic M X, 2 Megapíxeles, y ángulo de polarización.

5.2.2. Microscopía electrónica de barrido y espectroscopía de dispersión energética de rayos X

Se realizaron diferentes observaciones a la muestra en el Laboratorio de microscopía electrónica de Barrido en el Instituto de Geología de la UNAM, Se empleó un microscopio EVO ® de la marca Zeiss acoplado a un detector de rayos X marca Bruker modelo XFlash 30. Las diferencias de potencial suministradas variaban entre 50 kV y 100 kV. Con fin de evaluar la composición elemental, se realizaron mapeos con EDS, además que se pudo cuantificar relativamente la abundancia mineralógica presente en cada sector de la muestra en cuestión, de la mira enfocada.

5.2.3. Microscopía de Fuerza atómica y fuerza magnética

Realizado en el Instituto de Ciencias Nucleares, en ayuda de un SPM, Marca JEOL modelo JSPM-5200, usando puntas de valores teóricos de 300 kHz y con constante de fuerza de 40 N/m para MFA, y se usaron puntas de constante de 75 kHz con 3 N/m imantadas con imanes de 3000 Gauss durante 8 hrs. Para el análisis se hacían barridos de 15 μm x 15 μm . En total se tomaron 108 imágenes, de las cuales se eligieron las representativas donde el campo magnético era de 268 G/m.

5.3. Dinámicas moleculares

Se establecieron las condiciones mineralógicas y cristalográficas, en las cuales el olivino tenía mayor campo magnético y se investigó el posible campo eléctrico presente en la Tierra primitiva para poder simular foto inducción. Se observaron cambios en las estructuras cristalinas y las diferentes orientaciones de los cristales de alanina, dependiendo de su configuración enantiomérica y de las interacciones de los minerales presentes en esta meteorita.

Para realizar las dinámicas se planteó un sistema de celda unidad de forsterita (el polimorfo más abundante de la matriz mineralógica de la meteorita Allende, es decir que es un silicato rico en magnesio y hierro) rodeada por 1, 3, 6 y 12 alaninas. Se simuló el sistema mediante dinámica molecular newtoniana, utilizando los campos de fuerza MM+, utilizando el programa: HyperChem 8.0.10 (HyperCube 2010). Los campos MM+ calcularon la energía potencial del sistema y concuerdan que la estructura de menor energía es una estructura de 16 alaninas atraídas mediante fuerzas electrostáticas al cristal ortorrómbico del olivino forsterita.

Todos los cálculos se realizaron con esquema de número de partículas constante, en un baño isotérmico e isocórico (NVT). Por lo cual se pueden determinar los parámetros energéticos en el equilibrio de sorción en el mineral. Los cálculos fueron propuestos a 50 ps de tiempo, en cada uno de los diversos sistemas. Se evaluaron las energías de solvatación, se calcularon los sistemas a 4 y 300 K, puesto que son temperaturas estimadas en la superficie de la meteorita y en la Tierra primitiva.

Para las simulaciones se buscó la conformación más estable de sorción de la alanina de manera de doble ión y se observó el comportamiento del carboxilo del aminoácido. Para ellos se fijaron los átomos principales de la celda unidad, después se le agregaron los hidrógenos para tenerlos en modo hidroxilo, además cada doble ion fue sometido a 5 ciclos de relajamiento que consistían en minimización hasta un RMSD de 0.09 kcal/mol y un relajamiento en dinámica de 2 ps.

Se evaluaron 3 tipos de sistemas:

- Uno en el cual sólo se introdujeron L-alaninas
- Uno en el cual sólo se introdujeron D-Alaninas
- Y uno donde existía una proporción de 50% L y 50% D alaninas

En cada sistema, se modelaron una celda unidad de Forsterita (Fe 0.9), rodeada de 16 aminoácidos.

Cada sistema se evaluó por separado utilizando una computadora con CPU Ryzen 7® 3700 X, tarjeta de video con soporte a CUDA GeForce 710 GT y 16 GB de RAM.

6. Resultados del proyecto

6.1. Caracterización espectroscópica

6.1.1. Análisis mineralógico mediante FTIR

Se observaron las diferentes configuraciones de los silicatos en la muestra. Se caracterizaron dióxidos y se resolvió la presencia de enstatitas. También se confirma la fase mineral mayoritaria en la matriz rocosa y se observó el predominio de grupos hidroxilos en la superficie de la muestra (figura 4).

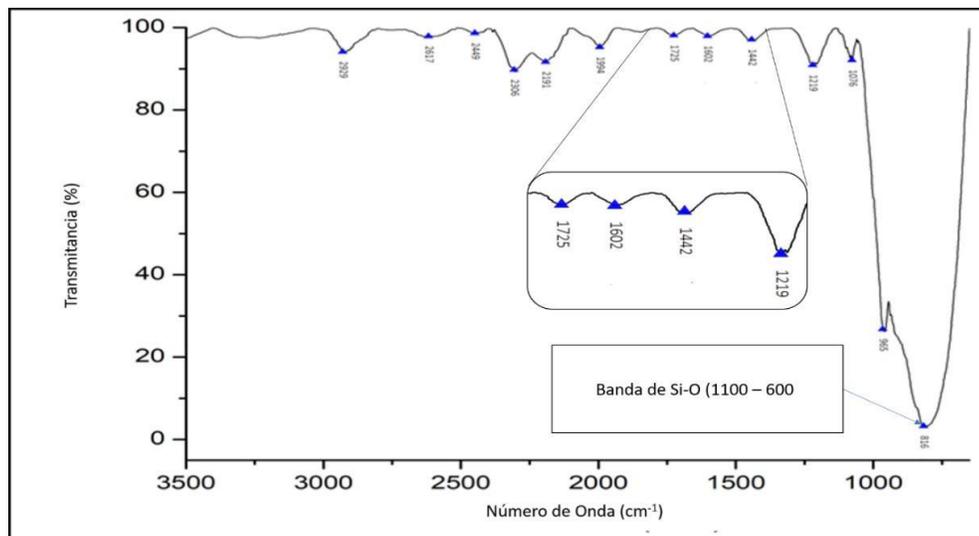


Figura 4 Espectro de infrarrojo de la muestra de la meteorita Allende, tomada por ATR-FTIR, con 64 Scan 10 veces usando una ventana espectral de 3500 cm^{-1} a 600 cm^{-1} . En este espectro se encuentran los picos característicos en 1602 , 1725 y 1442 cm^{-1} , pertenecientes a algunos compuestos ortosilicados la que refiere a la forsterita. También se destaca la banda de Si-O que es intensa y va desde 1000 cm^{-1} hasta 600 cm^{-1} . Para contrastar se hizo un blanco de la resina que envolvía a la muestra montada, de poliacrilato, por esto no se toma en cuenta las bandas orgánicas de 2019 cm^{-1}

6.2. Análisis de Difracción de Rayos X

Se realizó un barrido de rayos X para caracterizar las distintas fases cristalinas presentes en esta muestra. Se hizo un estudio preliminar de los porcentajes de fases cristalinas.

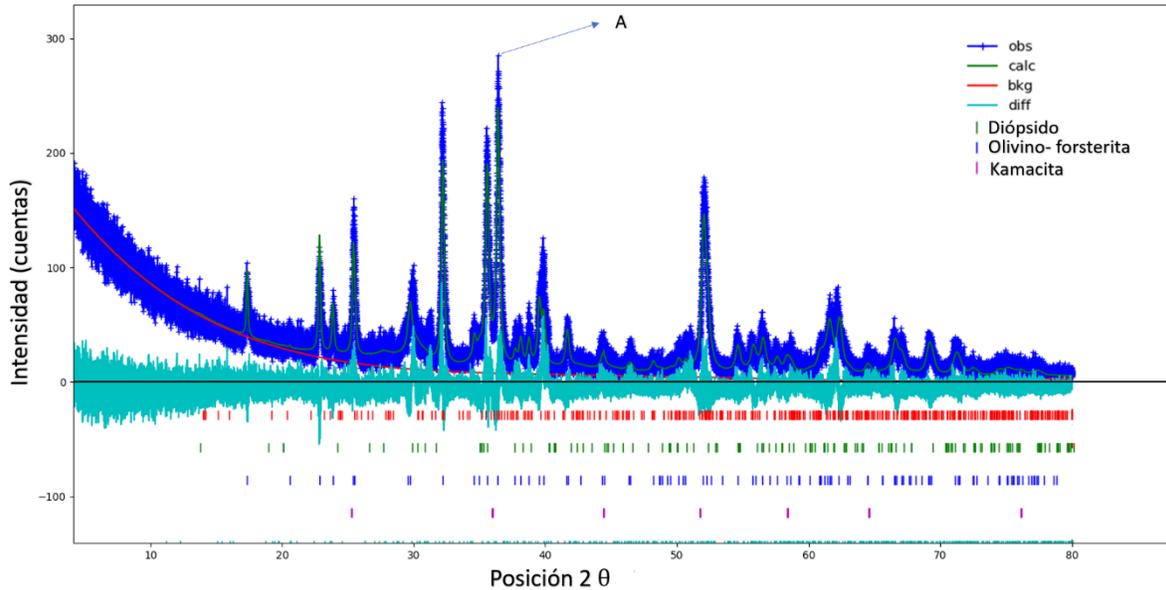


Figura 5 Patrón de difracción de Rayos X de la muestra de meteorita Allende..

En este difractograma (figura 5) analizado por el programa Topas de Brucker (Coelho, 2018), se observa que la fase mineral mayoritaria es piroxeno tipo diópsido, esta información se deberá repetir con difractograma de mayor duración, puesto que se informa que la muestra tiene un exceso de Clinoenstatita y adicionalmente algunos picos podrian opacar a la forsterita picos de $2\theta = 23.5^\circ$ y 36.5° (figura 5), sin embargo, estos 2 picos aparecen y se deberá repetir el experimento para corroborar, ya que el número de cuentas no es lo suficiente para poder cuantificar dichas fases (tabla 1).

Fase Mineral encontrada	Porcentaje	Entrada PDF
Olivino Fosterico	63.8	ICDD 01 071 1635
Piroxeno tipo Diópsido	36.3	ICDD 01 089 0837
Albita	2	ICDD 00 009 0466
Kamacita Fe 0.9 Ni 0.1	4	ICDD 03 065 7752

Tabla 1. Resultado de la difracción de rayos X

6.3. Caracterización microscópica

6.3.1. Microscopía de transmisión de luz polarizada

Con ella se observaron de manera preliminar, los cristales presentes en la matriz de la meteorita, así como la descripción morfológica y cristalográfica preliminar de los cóndrulos presentes en la muestra (figura 6). Las propiedades cristalográficas se evaluaron mediante imágenes de interferencia bajo luz polarizada. Con esta microscopía se midieron los condros y se observó cualitativamente la matriz.

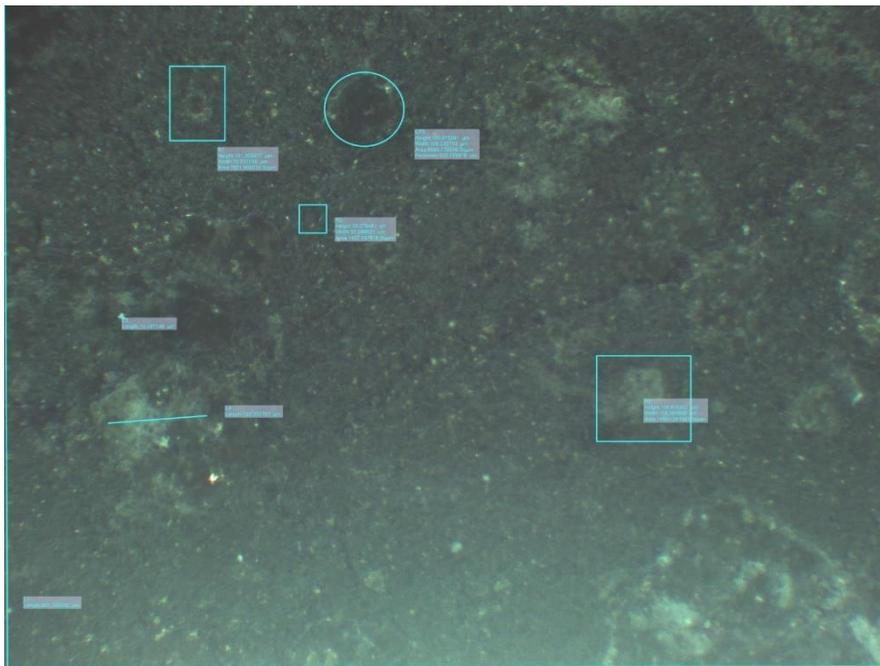


Figura 6 Imagen polarizada del sector G6, en el cual se observan diversas fases minerales como olivino (matriz), fases minerales ricas en calcio y aluminio, también se alcanzan a ver vestigios de metales como hierro y níquel.

Con base a la información cualitativa que da esta imagen de transmisión de luz, con polarización de 50° , se determinó observar el mismo sector con microscopía electrónica de barrido, y con el EDS (figura 8) hacer un perfil elemental de la extensa zona.

6.4. Microscopía electrónica de barrido

Se colocó el microscopio a una diferencia de potencial de 50 kV, para ver los cristales (en un sector aproximado de $1 \mu\text{m}$, se observaron cúmulos de olivino, la presencia de sulfuros de hierro, la troelita que se obtuvo en el difractograma, se puede denotar como las zonas blancas que se tiene en la figura 7. Adicionalmente se decidió corroborar el difractograma

con un espectro de dispersión de Rayos X del olivino, buscando los perfiles de magnesio, hierro y oxígeno (figuras 7, 8, 9 y 10).

Sin embargo, también se encontró la presencia de hierro y azufre (troilita) y la presencia de hierro y níquel, el mineral que se expresó en el difractograma conocido como Kamacita.

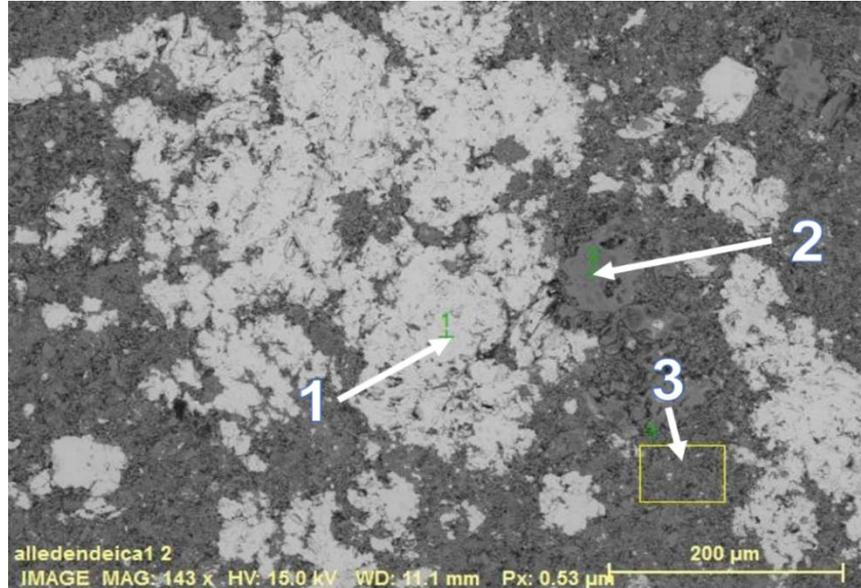


Figura 7 Micrografía del sector G6, visto con microscopía electrónica de barrido, usando 50 kV, E esta muestra se ven cúmulos de clinostenita 3, troilita (1) y olivino (2), del cual se decidió tomar EDS en listando en las figuras 8 y 9.

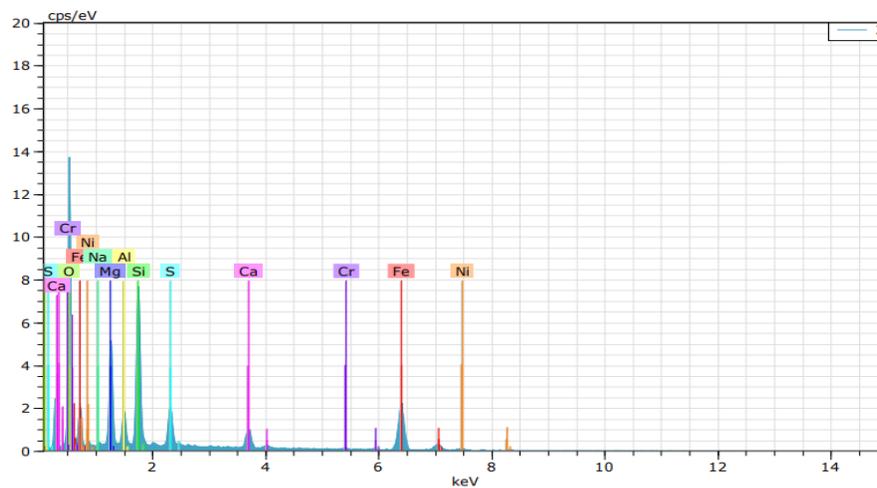


Figura 8 Espectro EDS de los puntos 23, 24 y 25 de la figura 10.

Adicionalmente se realizó un mapeo elemental a dicha zona, destacando los elementos de hierro azufre y níquel, presente en todas las meteoritas, y buscando posibles fases minerales que proporcionen un ambiente magnético local.

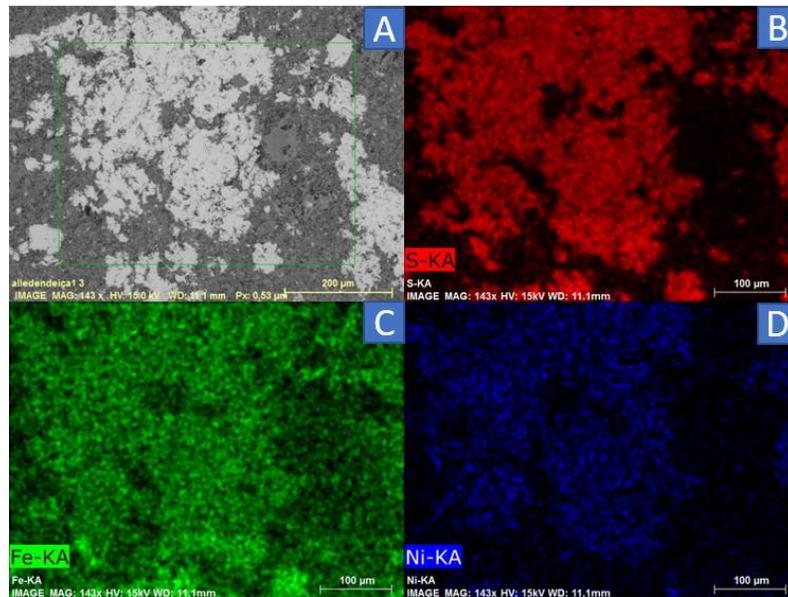


Figura 9 Acercamiento del sector G6, para hacer mapeo elemental EDS

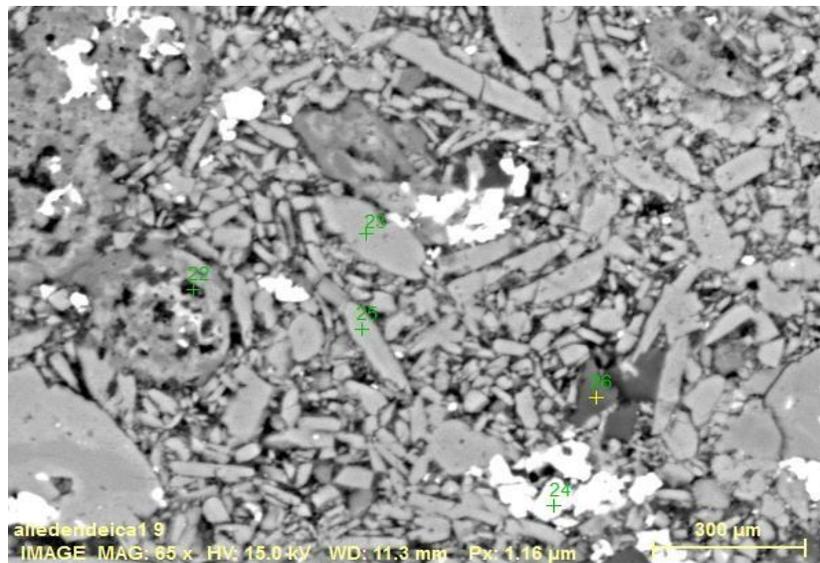


Figura 10 Imagen de electrones retrodispersos, enfocando el sector 3 de la figura 7, se nota la presencia de cúmulos de olivino, con sectores de troilita.

Para evaluar lo homogéneo de la micrografía de la imagen 7, hizo una ampliación con electrons retrodispersos (imagen 10), y se decidieron tomar 3 diferentes puntos de los cristales, Con ellos se tomó EDS y se denotó en la figura 8, se concluye por análisis de óxidos que se tiene una forsterita de 56.3% Fe. Con los datos obtenidos se decidió simular las interacciones enantioméricas de D y L alanina sobre la olivina -forsterita 56.3% Fe.

También, se consideran los campos magnéticos proporcionados por los minerales que están ubicados en la matriz. Se realizó un mapeo de EDS, para ubicar los distintos sectores de la muestra blanca de la figura 7 en él se observa que el azufre tiene una distribución homogénea sobre el sector 3 de la figura 9, cabe mencionar que este mineral tiene propiedades magnéticas, las cuales se midieron con ayuda de la microscopía de Fuerza Magnética. También se observa que la matriz está rodeando este sector, donde también se encontró gran presencia de magnesio. Por lo cual se decidió simular la matriz de forsterita (dato obtenido por el difractograma de Rayos X por la presencia de los picos de presentes de 2θ 17° 23.5° y 36.5°), y someterse a campos magnéticos en dirección Z.

6.4.1. Microscopía de fuerza atómica

Se evaluaron las diversas áreas contenidas en la muestra, se fijaron posibles sitios donde la matriz circundaba materiales magnéticos (se evaluaron gracias al mapeo por espectroscopia de dispersión energética de rayos X secundarios) y se observaron las diversas formas cristalinas presentes en la matriz. Se corroboró la diversidad química de las zonas elegidas mediante las imágenes de fase y se establecieron los parámetros topográficos de los microcristales presentes en la muestra. Se encontraron formas minerales como Serpentinitas en contradas por SEM figura 10, donde se observan los cristales de algunos silicatos contrastados con las imágenes de MFA (figura 11 y figura 12), minerales barrados de calcio y aluminio. Se evaluó la existencia de elementos poco reportados como cobalto. También se empleó la MFA en su modo magnético de operación para la medición local de campos magnéticos en la muestra, se observó como la conjunción de diversos minerales magnéticos, modifican las direcciones del campo magnético y se planteó la posibilidad que este tipo de campo promueva una cristalización diferente a la habitual informada de D y L alaninas (figura 13 y 14).



Figura 11 Imagen de serpentinitas rodeadas por la matriz mayoritaria de olivino forstérico. Imagen de topográfica de microscopia de fuerza atomica.

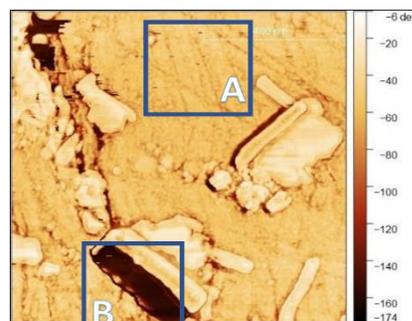


Figura 12 Imagen de serpentinitas rodeadas por la matriz mayoritaria de olivino forstérico. Imagen de microscopia de fase.

En la figura 12 se observa que tiene una composición químicamente homogénea, se pueden ver los patrones estriados inetercruzados en la parte superior la esquina superior derecha, y se denotan 2 corpúsculos en forma de cilindro que son serpentinitas, según el perfil de la figura 11. Además, la imagen no es concluyente al encontrar sectores donde la punta no hizo el contacto adecuado observado en la figura 12 en el sector inferior izquierdo, de los que se cree que es una serpentinite., pero se puede afirmar que toda la imagen de fase muestra que se tiene una estructura química muy similar en toda la imagen, perteneciente a la matriz donde se predomina el olivino fase forstérico al 50% de Fe.

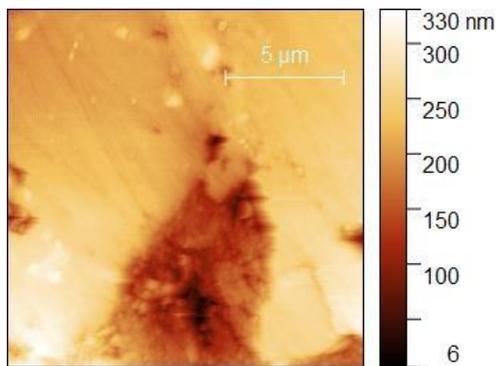


Figura 13 Imagen topográfica de frontera de grano, entre olivino y troelita.

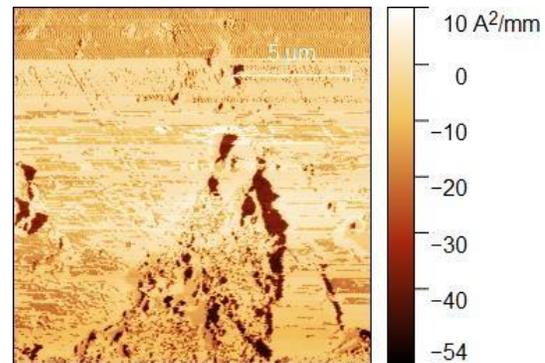


Figura 14 Micrografía de Fuerza magnética de la frontera de grano, de olivino y de troelita.

Por último, se caracterizó una frontera de grano, entre olivino y troelita. Se analizó el campo magnético promedio en esta zona delimitada, de $10 \text{ A}^2/\text{mm}$ (figuras 13 y 14). Se establecieron condiciones magnéticas para posibles cálculos en el futuro empleando campo magnético de $(10 \text{ A}^2/\text{mm})$ en el calculo, puso que es el campo magnetico promedio en la matriz de la muestra, en granos definidos en la imagen de SEM figura 10 puntos (23,25) de fase mineralógica compuesta por olivino fase forsterita 53% Fe.

6.5. Dinámicas moleculares

Los sistemas de L-alanina y D-alanina presentan una energía inicial de -71 kcal/mol y 154.0 kcal/mol respectivamente, en cada uno de los sistemas con variables diferentes; es decir, que: la temperatura, el campo eléctrico o las caras de los minerales con oxígenos o iones metálicos, influyen para la que las L-alaninas se repelan del cristal. Con la energía potencial de la conformación que la dinámica calculó (-227 kcal/mol), se comparó a la energía proporcionada por el virial del sistema (225 kcal/mol). La información dada dice que el sistema converge a una estructura de baja energía y de coeficiente de RMS de 0.1, lo cual indica que el sistema se encuentra en un estado momentáneo de equilibrio de sorción con las D-alaninas, puesto que el desplazamiento de las moléculas es casi nulo y converge a un estado de mínimo energía.

En contraste, los sistemas con D-alanina (figura 15) muestran que el sistema está en equilibrio cuando las alaninas esta sorbidas en el mineral y no repelidas a diferencia de las L-alaninas (figura 17).

Se calcularon los parámetros de energía potencial, (-653 kcal/mol) que son muy similares a las energías totales de los sistemas con las alaninas levóginas. Otro resultado de estas dinámicas es que en ambos sistemas el RMS es menor a 0.1 lo cual indica que se encontró un mínimo de energía muy favorable para los sistemas. En cuanto a los parámetros de temperatura y estructura enantiomérica de las alaninas; se hace notar que, al incrementar la temperatura del olivino, baja el conteo de sitios de ocupación de D-alanina, lo que indica que para este sistema la temperatura influye para la desorción de los aminoácidos, a 298 K se observa que se disminuye a 25% la sorción de aminoácidos en las caras del mineral.

Una vez encontrada la conformación de mínima energía de las D-alaninas, se realizaron cálculos de estabilidad y de conformación de las mismas alaninas que permita la formación de un enlace amida tipo peptídico. Se observó que la basicidad (métodos QASR) de este mineral es capaz de promover un estado de transición intermedio (de geometría triangular) que promueve la interconversión enantiomérica de la misma alanina.

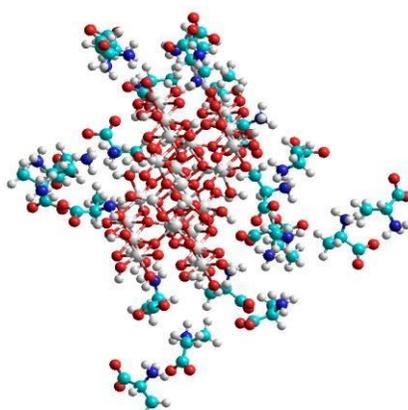


Figura 15 Dinámica molecular en campo de fuerza MM+ de 16 moléculas de D-Alaninas alrededor las 6 caras del olivino, mostrando gráficamente las configuraciones ancladas e los sectores de magnesio y algomerandose en un aminoácido ancla.

	Dinámica 278 K	Dinámica 4 K
Energía Total del sistema	-668.2 kcal/mol	-90.63 kcal/mol
Energía libre de Gibbs	-668.7 kcal/mol	-90.63 kcal/mol
RMS	19.7 kcal/mol	0.473

Tabla 2 Resultados de las dinámicas moleculares de los sistemas de D-alanina que se estaban encontrando con la celda unidad de forsterita, en vacío sin campo magnético ni eléctrico.

Las dinámicas al sistema D, muestran que las moléculas no tienen afinidad por el olivino forsterita, sin embargo, las moléculas de la D-Alanina tienen predilección por aglomerarse

entre ellas, y si una sola molécula tiene interacciones intermoleculares con una sola región de la celda (contrastando las figuras 15 y 17), con esto se puede decir que este sitio donde se ancló una sola alanina, ayudará a que las demás moléculas de aminoácidos se empiecen a fijar alrededor de la primera, y que se empiece a autoensamblarse un cristal. El efecto del aminoácido que llamaremos “*ancla*” se puede observar en la parte superior izquierda de la figura 15, obteniendo datos de el sistema es endergónico (tabla 2). También se evaluaron las energías presentes durante el tiempo de dinámica. Se puede ver en la figura 14, que las moléculas tienden a llegar al potencial de -250 kcal/mol, cuando la dinámica de 4 K llega a un valor aproximado a la energía descrita arriba, en un lapso de 30 ps, para corroborar se propone hacer una dinámica de mayor tiempo en el futuro, y corroborar que efectivamente se llegue a un mínimo de energía potencial parecido a -250 kcal/mol.

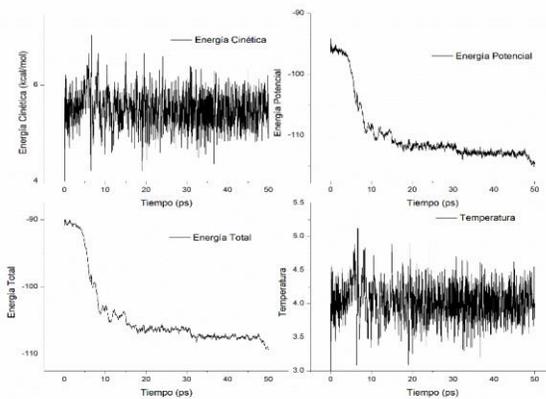


Figura 16 Gráficas de las dinámicas utilizando el campo de fuerza MM+, 50 ps de 16 D- alaninas rodeando una celda unidad de olivino. Emulando la temperatura de 4 K.

Con los gráficos de la dinámica a 4 K, de 16 moléculas de D-alanina también se observa que a la energía cinética no fluctúa en un intervalo muy abierto (4- 6 kcal/mol) (figura 16) y que, durante esta dinámica, las moléculas se mantienen juntas, lo que corrobora lo mencionado anteriormente. Cabe mencionar que se hizo la comparación con la dinámica 278 K, y es completamente distinta, puesto que la energía al final converge (modelo de como queda el sistema de la L- alanina en la figura 17).

En la figura 18, se observa que la L-alanina no tiene afinidad por la fase mineral, las energías potenciales al inicio de la dinámica iniciales son de 154.091 kcal/mol, por lo cual desde la optimización se nota que el sistema no será estable para el autoensamblaje, la dinámica converge en una energía de 679 kcal/mol a 278 K y 214 kcal/mol en los sistemas corridos a 4 K y en vacío (tabla 3).

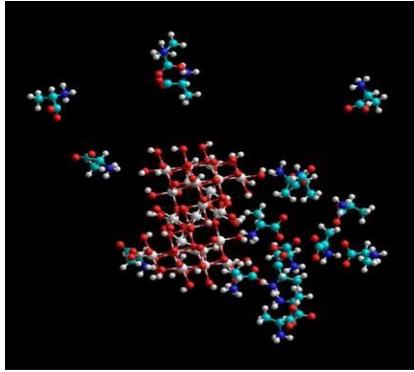


Figura 17 Imagen de la dinámica con 16 alaninas L, rodeando una celda unidad de olivina.

	Dinámica 278 K	Dinámica 4 K
Energía Total del sistema	679.5 kcal/mol	214.0 kcal/mol
Energía libre de Gibbs	679.5 kcal/mol	214.0 kcal/mol
RMS	18.8 kcal/mol	1.55 kcal

Tabla 3 Resultados de las dinámicas moleculares de los sistemas de L-alanina que se estaban encontrando con la celda unidad de forsterita, en vacío sin campo magnético ni eléctrico.

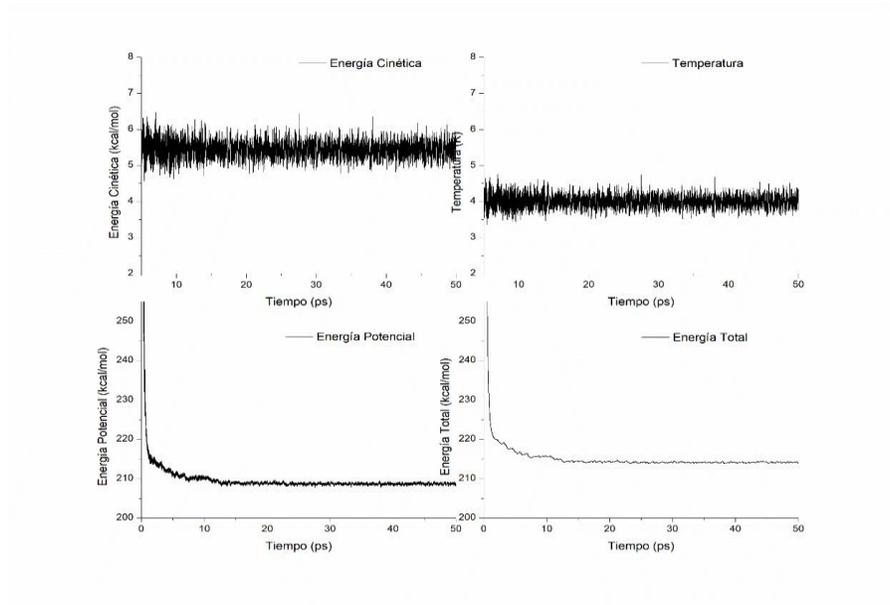


Figura 18 Resultados de energía potencial, temperatura, energía cinética y energía total.

En este gráfico se denota que la dinámica tiene la energía potencial en un mínimo y que este está estabilizado en 210 kcal/mol, esto muestra que se encontró una conformación de mínima energía y que el sistema está en un nivel alto de energía pero que se empiezan a aglomerar las L-alaninas.

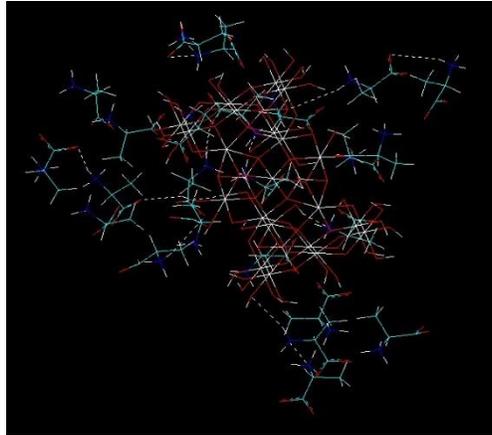


Figura 19 Dinámica 8 D alaninas con 8 L alaninas soportados con una celda unidad de olivino.

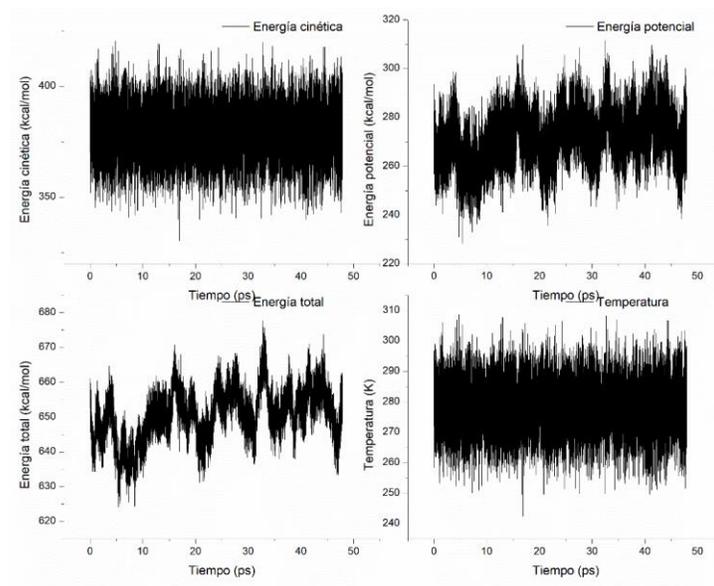


Figura 20 Gráficos de energía potencial, temperatura, energía cinética y energía total.

Para corroborar los datos de que la D-alanina sí promueve una nucleación, para el arreglo de las D-alaninas, se corrió un sistema de 8 L-alaninas con 8 D-alaninas, en las cuáles se corrobora que las D-alaninas prefieren aglomerarse para autoensamblarse.

En la figura 19 se muestran la formación de puentes de hidrogeno, entre las moléculas de D-alanina y se puede ver **que** se corroboran los resultados mostrados en las gráficas oscilantes de la figura 20. Con los datos estabilizados se observa que a los 50 ps, se tiene una estructura estable, puesto que su RMS es de 1.9 kcal/mol (figura 19 y 20).

Estos datos concluyen únicamente el cristal de D-alanina es estable a 4 K, en vacío y usando olivino como centro de nucleación.

7. Conclusiones del Proyecto

- 1) Se establecieron las características cristalográficas, mineralógicas y fisicoquímicas de la muestra de meteorita Allende, así como se detallaron las condiciones de la topología y morfología de la composición más abundante en la muestra en parte de la matriz de la meteorita, que era olivina fase forsterita de composición 53% Fe.
- 2) Se simularon computacionalmente las interacciones entre mezclas enantioméricas de alanina y el mineral más abundante de la matriz de la meteorita, reiterando que las interacciones intermoleculares puede hacer adsorciones estables con los cristales de D-alanina, puesto que se forman puentes de hidrogeno, además que se tiene una energía libre de -159 kcal/mol.
- 3) Se confirma la Hipótesis en el sentido en que el mineral olivino sorbido por aminoácidos D, promueve una estructura cristalina. Se someterá a validación experimental en futuros proyectos si estos promueven condensaciones peptídicas.

8. Balance General del Proyecto

Nuestros resultados confirman parcialmente la hipótesis establecida de que los aminoácidos D se pueden ir acoplando en cristales, y se puede promoverse un autoensamblaje, se deberá corroborar si este auto ensamblaje permitiera la formacion de enaces péptidos. Los resultados de este proyecto serán publicados en una revista indizada. Esto nos permite avanzar adecuadamente en nuestra publicación. Los datos están relativamente completos en nuestros resultados.

9. Perspectivas para futuros proyectos

1. Realizar una corrida de Difracción de rayos X con más tiempo para incrementar el número de cuentas
2. Realizar la prueba de microscopía de fuerza atómica con una muestra que no esté fija con resina para evaluar el comportamiento de la alanina, usando una punta de MFA funcionalizada.
3. Realizar las dinámicas moleculares en software que permita la emulación de inorgánicos y orgánicos, durante más tiempo para corroborar que se llega a un estado mínimo de energía potencial.
4. Realizar más dinámicas moleculares, con diversos campos de fuerza y corroborar el comportamiento de la alanina en disolución.

5. Parametrizar los elementos inorgánicos para poder hacer más fidedigna la simulación molecular
6. Someter los sistemas simulados, a campos eléctricos y magnéticos pulsados utilizando métodos semi empíricos de TNDO y PM3, para observar polarización de las moléculas, efectos piezoeléctricos en los agregados simulados.
7. Emular los patrones de difracción utilizando promedios de función de distribución radial con las posiciones de los átomos calculadas en las últimas dinámicas.
8. Observar con más detenimiento el efecto de diversos sectores de la celda unidad, exponiendo diferentes elementos.
9. Emular las condiciones de la meteorita Allende *in vitro*, para ver si la cristalización de alanina sometida a campos magnéticos y radiación gamma promueve la formación de un enlace peptídico.
10. Realizar la cristalización con campos eléctricos y magnéticos variables, y no únicamente fija, sino que anexar y estudiar el comportamiento de la alanina con comportamiento de los campos electromagnéticos helicoidales o circulares.

10. Referencias

1. Berendsen, H. J. C., van der Spoel, D., y van Drunen, R. (1995). GROMACS: A message-passing parallel molecular dynamics implementation. *Computer Physics Communications*, 91(1–3), 43–56.
2. Bischoff, A. (2001). Meteorite classification and the definition of new chondrite classes as a result of successful meteorite search in hot and cold deserts. *Planetary and Space Science*, 49(8), 769–776
3. Clarke, C. R. S., Jarosewich, E., Mason, B., Nelen, J., Gomez, M., y Hyde, J. R. (1971). Allende, Mexico, Meteorite Shower. *Smithsonian Contributions to the Earth Sciences*, 5, 1–53.
4. Condie, K. C. (2016). *Chapter 10 - Comparative Planetary Evolution* (K. C. B. T.- E. as an E. P. S. (Third E. Condie (ed.); pp. 317–367). Academic Press.
5. Cronin, J. R., y Pizzarello, S. (1983). Amino acids in meteorites. *Advances in Space Research*.
6. Dodda, L. S., de Vaca, I., Tirado-Rives, J., y Jorgensen, W. L. (2017). Hypercube, Inc., HyperChem(TM) Professional 8. 010 1115 NW 4th Street Gainesville
7. Hernández-Bernal, M. del S., y Solé, J. (2015). *La edad de algunos meteoritos mexicanos: desde el origen del sistema solar hasta su llegada al laboratorio*. 16(6),
8. Hess, B., Kutzner, C., Van Der Spoel, D., y Lindahl, E. (2008). GROMACS 4: Algorithms for highly efficient, load-balanced, and scalable molecular simulation. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 4(3), 435–447.
9. Hocquet, A., y Langgård, M. (1998). An Evaluation of the MM+ Force Field. *Molecular Modeling Annual*, 4(3), 94–112. <https://doi.org/10.1007/s008940050128>
10. Jarosewich, E., Clarke, C. R. S., y Barrows, J. N. (1987). Allende Meteorite Reference Sample. *Smithsonian Contributions to the Earth Sciences*.
11. K., D. H. P. y D., y GbR, B. (2019). *Match! - Phase Identification from Powder Diffraction*,. Brandenburg GbR, Kreuzherrenstr. 102, 53227 Bonn, Germany. <https://www.crystalimpact.de/match>
12. Lipschutz, M. E., y Schultz, L. (2007). CHAPTER 13 - Meteorites**Actual meteorite (chondrite) dust is embedded in the stamp reproduced above. The stamp was issued by the Austrian postal service in 2006. In L.-A. McFadden, P. R. Weissman, y T. V Johnson (Eds.), *Encyclopedia of the Solar System (Second Edition)* (Second Edi, pp. 251–282). Academic Press.
13. Mcgeoch, M. W., Dikler, S., y Mcgeoch, J. E. M. (n.d.). *Hemolithin: a Meteoritic Protein containing Iron and Lithium*.

14. Miller, S. L. (1953). A production of amino acids under possible primitive Earth conditions. *Science*, 117(3046), 528–529.
15. Murae, T. (1994). FT-IR Spectroscopic Studies of Major Organic Matter in Carbonaceous Chondrites Using Microscopic Technique and Comparison with Terrestrial Kerogen. *Antarctic Meteorite Research*.
16. Oró, J., Gibert, J., Lichtenstein, H., Wikstrom, S., y Flory, D. A. (1971). Amino-acids, aliphatic and aromatic hydrocarbons in the murchison meteorite. *Nature*.
17. Parker, E. T., Cleaves, H. J., Callahan, M. P., Dworkin, J. P., Glavin, D. P., Lazcano, A., y Bada, J. L. (2011). Prebiotic Synthesis of Methionine and Other Sulfur-Containing Organic Compounds on the Primitive Earth: A Contemporary Reassessment Based on an Unpublished 1958 Stanley Miller Experiment. *Origins of Life and Evolution of Biospheres*, 41(3), 201–212.
18. Tingle, t., Becker, c., y Malhotra, r. (1991). Organic-Compounds in the Murchison and Allende Carbonaceous Chondrites Studied By Photoionization Mass- Spectrometry. *Meteoritics*, 26(2), 117–127.
19. Tormo-Cifuentes, L. (2013). Estudio de meteoritos singulares por técnicas espectroscópicas y de luminiscencia no destructivas. In *tesis doctoral*. Universidad autónoma de madrid consejo.

11. Anexo I: Actividades académicas desarrolladas durante la maestría

11.1.1. Materias que se llevaron a lo largo de la maestría

Materia	Semestre que se tomó
Estadística I	2018-2
Fundamentos De Química Orgánica	2018-2
Principios De Estructura De La Materia	2018-2
Termodinámica Estadística	2018-2
Química De Radiaciones	2018-2
Difracción De Rayos X De Monocrystal	2018-2
Caracterización Físicoquímica De Polímeros	2019-1
Química De Radiaciones Del Estado Sólido	2019-1
Microscopía Electrónica Analítica	2019-1
Introducción A La Dinámica Molecular	2019-2

11.1.2. Carteles, reuniones y simposios

- Se presentó cartel en el noveno congreso nacional de cristalografía llevado a cabo en la Ciudad de Oaxaca en noviembre de 2018. Sobre los hallazgos preliminares hasta entonces del este proyecto.
- Se presentó cartel en el Congreso New Quests In Stellar Astrophysics Iv, Astrochemistry, Astrobiology And The Origin Of Life en Puerto Vallarta, México abril de 2019.
- Se realizó cartel y se presentó en la 11^o reunión de dinámica molecular, realizada en el hotel NH de la calle palma en el centro Histórico, celebrada del 14 al 16 de noviembre de 2019. Se presentó una simulación de un equilibrio de reparto de aminoácidos corroborando el coeficiente de reparto Octanol/agua de los aminoácidos glicina, alanina y fenilalanina. Se informó cómo se llevaba a cabo el reparto y se estudió como se alteraba el reparto según su estructura enantiomérica.
- Se asistió al tercer simposio de Quiralidad, celebrado el 26 de septiembre de 2019 en el Instituto de Ciencias Nucleares de la Universidad Nacional Autónoma de México.
- Se asistió al primer simposio de nanotecnología de México, que tuvo lugar en la Facultad de Química de la Universidad Nacional Autónoma de México el 3 de octubre de 2019.

11.1.3. Talleres de actualización

Se asistieron a 4 talleres de actualización para complementar algunos aspectos del proyecto de investigación como manejo de datos, empleo de equipo especializado y actualización en equipo de cómputo. A continuación, se enumeran:

- 9° Taller de Dinámica molecular, realizado en la ciudad de Cuernavaca Morelos de 27 de julio a 2 de agosto de 2019. Este taller apoyó en la diversificación de software que se puede emplear para la dinámica molecular, y para que se pueda validar los resultados obtenidos computacionalmente.
- Taller de Microscopía de Fuerza atómica, realizado 21 y 22 de noviembre en el Instituto de Ciencias Nucleares de la Universidad Nacional Autónoma México. Esta actividad se tomó para estudiar más a profundidad los aspectos de piezoelectricidad en las muestras de meteorita Allende. Se pretende hacer una estancia en algún futuro para aprender más técnicas de SPM.
- Taller de validación, impartido en el hotel PF de la zona rosa en la Ciudad de México, que tuvo cabida el 23 de noviembre 2019. Este taller se tomó para mejorar el tratamiento de los datos y para incrementar la calidad de los resultados que se reportarán mediante técnicas estadísticas.
- Taller de ICP-MS, realizado del 25 al 29 de noviembre de 2019. Se tomó este curso puesto que se quiere ampliar las técnicas de caracterización conocidas por el redactor de este texto, para ampliar y completar este proyecto.
- Taller de MFA, realizado del 9 al 11 de septiembre de 2020, impartido por el Centro de Investigación de Materiales Avanzados, vía online.