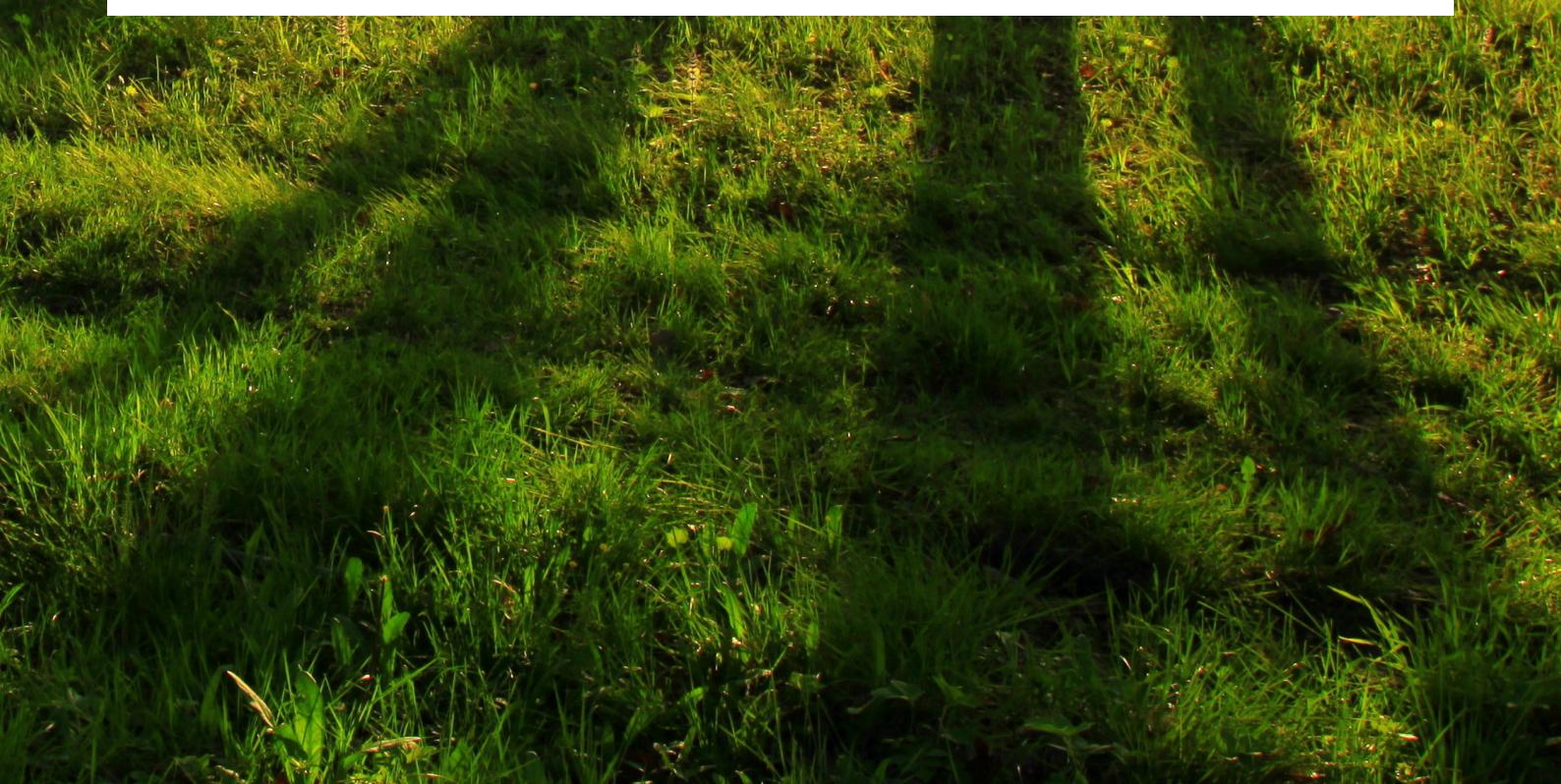


**Congreso Argentino de Fisicoquímica y
Química Inorgánica - La Plata 2021**



*En memoria del Profesor
Dr. Alejandro Jorge Arvia
14/01/1928-22/04/2021*

Comité Organizador

Presidente:

- Ing. Liliana M. Gassa

Vicepresidente:

- Dra. María Eugenia Tuceri

Secretaria:

- Dra. María Paula Badenes

Prosecretaria:

- Dra. Larisa Bracco

Tesorera:

- Dra. Carolina Vericat

Vocales:

- Dra. Carolina Lorente
- Dr. Ezequiel Wolcan
- Lic. Claudia Chacón Gil
- Lic. Valentín Villarreal
- Lic. Yoskiel Lorca
- Lic. Paolo Zucchini
- Dr. Fabricio Ragone
- Mag. Wilfred Espinosa
- Lic. Yeljair Monascal

Comité Científico

Presidente:

- Dra. Florencia Fagalde

Delegación UNS, Bahía Blanca:

- Dr. Juan Manuel Sieben
- Dra. Graciela Pilar Zanini
- Dra. Mariana Alvarez

Delegación CONEA, CAC - Buenos Aires:

- Dra. Verónica Lombardo
- Dr. Nahuel Montesinos

Delegación UNC, Córdoba:

- Dra. Belén Blanco
- Dr. Sergio Dassie
- Dr. Gustavo Pino

Delegación UNNE, Corrientes:

- Dra. María Fernanda Zalazar
- Dr. Emilio Luis Angelina (UNNE)

Delegación UNLP, La Plata:

- Dra. Andrea Lorena Picone
- Dra. Rosana Romano
- Dra. Melina Cozzarin
- Dr. Gustavo Ruiz

Delegación UNRC, Río IV:

- Dr. Walter A. Massad
- Dr. Mariano Correa
- Dr. Rodrigo Palacios

Delegación UNR, Rosario, Santa Fé:

- Dr. Sebastián Bellú
- Dr. Juan Carlos González

Delegación Santa Fé

- Dra. Claudia Neyertz

Delegación UNSL, San Luis:

- Dr. Germán Gómez
- Dra. Griselda Narda

Delegación UNSE, Santiago del Estero:

- Dra. Ana Ledesma
- Dra. Valentina Rey

Delegación Tucumán:

- Dra. Aída Ben Altabef
- Dr. Mauricio Cattaneo



UNIVERSIDAD
NACIONAL
DE LA PLATA



ASOCIACION ARGENTINA DE INVESTIGACION FISICOQUIMICA



XXII CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUÍMICA Y QUÍMICA INORGÁNICA LA PLATA 2021

ANÁLISIS TOPOLOGICO-CONFORMACIONAL DE TRES ANTOCIANIDINAS: PELARGONIDINA, CIANIDINA Y DELFINIDINA

Nicolas A. Szewczuk¹, Pablo R. Duchowicz¹, Alicia B. Pomilio ² y Rosana M. Lobayan³

¹ Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), CONICET, Universidad Nacional de La Plata (UNLP), Diag. 113 y 64, C.C. 16, Sucursal 4, 1900 La Plata, Argentina. nicolas.szewczuk@gmail.com; pabloducho@gmail.com

² Departamento de Bioquímica Clínica, Área Hematología, Hospital de Clínicas “José de San Martín”, Universidad de Buenos Aires, CONICET, Av. Córdoba 2351, C1120AAF Buenos Aires, Argentina. abpomilio@sinectis.com.ar; pomilio@ffyb.uba.ar

³ Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales y Agrimensura, Universidad Nacional del Nordeste, Avda. Libertad 5300, 3400 Corrientes, Argentina

Introducción

Las antocianas son pigmentos naturales hidrosolubles responsables de los atractivos colores rojo, anaranjado, púrpura, violeta y azul de la naturaleza, que se están usando como colorantes alimentarios para reemplazar a los sintéticos. Protegen contra los efectos nocivos de la radiación UV y brindan actividad antioxidante, antiviral, antimicrobiana, antiinflamatoria, antiangiogénica y anticarcinogénica, entre otras.

De todas las antocianidinas que actualmente se conocen, las más importantes son cianidina, delphinidina, malvidina, peonidina, pelargonidina y petunidina. En este trabajo se busca caracterizar y comprender las estructuras de pelargonidina, cianidina y delphinidina por ser las más representativas en diferencias del anillo B.

Resultados

El estudio de las estructuras se realizó utilizando la teoría funcional de la densidad (DFT) implementada en el paquete del software Gaussian 03. La optimización de estas estructuras se llevó a cabo utilizando el funcional híbrido de tres parámetros de Becke con el funcional de correlación propuesto por Lee-Yang-Parr, dando lugar al conocido método B3LYP. El conjunto de bases utilizado fue 6-311++G (d,p) para todos los átomos. El análisis vibracional se realizó al mismo nivel de teoría sobre todas las geometrías optimizadas de manera de poder verificar si son mínimos locales o puntos de ensilladura sobre la superficie de energía potencial de la molécula. El análisis del espacio conformacional conduce a la obtención de cuatro confórmeros de mínima energía para el caso de pelargonidina, doce para cianidina y siete para delphinidina. Se desarrolló una nomenclatura específica con el fin de brindar información estructural de los diferentes confórmeros.

Para un análisis más detallado, se determinaron los ΔE y ΔG de cada confórmero. En base a estos datos, se determinaron las poblaciones relativas calculadas por la distribución de Maxwell-Boltzmann a 298,15 K para cada confórmero. Se estudió la rotación del anillo B con respecto a la subestructura de benzopirilio para el confórmero de menor energía de cada compuesto, y la ubicación espacial del oxidrilo en la posición C-3. Se evaluó el momento dipolar eléctrico permanente (μ) y la polarizabilidad molecular ($\langle\alpha\rangle$). Para tener en cuenta todo el espacio conformacional, se realizó un promedio estadístico a 298,15 K mediante la distribución de Maxwell-Boltzmann en cada componente cartesiano de μ y para los valores de ($\langle\alpha\rangle$). También se obtuvo el potencial electrostático molecular (MEP).

Conclusiones

Los resultados obtenidos permitieron explicar el comportamiento y la reactividad relativa de estas tres antocianidinas, así como esclarecer aspectos conformacionales.