



**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 Tucceri

### 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. Maria 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, Rio IV:

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

### Delegación UNR, Rosario, Santa Fé:

- Dr. Sebastián Bellú
- Dr. Juan Carlos Gonzalez

### 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 TOPOLÓGICO-CONFORMACIONAL DE TRES ANTOCIANIDINAS: PELARGONIDINA, CIANIDINA Y DELFINIDINA

Nicolas A. Szewczuk<sup>1</sup>, Pablo R. Duchowicz<sup>1</sup>, Alicia B. Pomilio <sup>2</sup> y Rosana M. Lobayan<sup>3</sup>

<sup>1</sup> 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](mailto:nicolas.szewczuk@gmail.com); [pabloducho@gmail.com](mailto:pabloducho@gmail.com)

<sup>2</sup> 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](mailto:abpomilio@sinectis.com.ar); [pomilio@ffy.uba.ar](mailto:pomilio@ffy.uba.ar)

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

#### Introducción

Las antocianinas 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, delfinidina, malvidina, peonidina, pelargonidina y petunidina. En este trabajo se busca caracterizar y comprender las estructuras de pelargonidina, cianidina y delfinidina 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 conformeros de mínima energía para el caso de pelargonidina, doce para cianidina y siete para delfinidina. Se desarrolló una nomenclatura específica con el fin de brindar información estructural de los diferentes conformeros.

Para un análisis más detallado, se determinaron los  $\Delta E$  y  $\Delta G$  de cada conformero. En base a estos datos, se determinaron las poblaciones relativas calculadas por la distribución de Maxwell-Boltzmann a 298,15 K para cada conformero. Se estudió la rotación del anillo B con respecto a la subestructura de benzopirilio para el conformero de menor energía de cada compuesto, y la ubicación espacial del oxidrilo en la posición C-3. Se evaluó el momento dipolar eléctrico permanente ( $\mu$ ) 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  $\mu$  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.