



## **XXVIII Comunicaciones Científicas y Tecnológicas**

Orden Poster: CE-020 (ID: 2569)

**Autor:** Spinnenhirn , Erica Danisa

**Título:** ESTUDIO TEÓRICO-EXPERIMENTAL DE LA ACTIVIDAD ANTIOXIDANTE DE COMPUESTOS FENÓLICOS DETECTADOS EN VAINAS DE MUCUNA PRURIENS

**Director:** Vallejos, Margarita de las Mercedes

**Co-Director:** Traffano Schiffo, María Victoria

**Palabras clave:** L-Dopa, ácido cafeico, Funcional de la Densidad

**Área de Beca:** Cs. Naturales Y Exactas

**Tipo Beca:** Evc - Cin

**Periodo:** 05/09/2022 al 31/08/2023

**Lugar de trabajo:** Iquiba Nea - Inst. De Química Básica Y Aplicada Del Nordeste Argentino

**Proyecto:** (22V001) Estructura, reactividad y mecanismo de reacción de compuestos con potencial efecto biológico identificados en desechos de la agricultura.

### **Resumen:**

*Mucuna pruriens* (MP) es una legumbre que se cultiva en la región del Nordeste Argentino (NEA). Sus semillas son utilizadas como fuentes alimenticias mientras que sus vainas son descartadas. En las vainas de MP se han detectados elevadas cantidades de compuestos fenólicos, entre los que se destacan la L-3,4-dihidroxifenilalanina o L-DOPA (LD), un precursor del neurotransmisor cerebral dopamina que regula el sistema nervioso central. Asimismo, se ha encontrado ácido cafeico (AC) que al igual que la LD, puede actuar como antioxidante. Los compuestos antioxidantes presentan efectos beneficiosos para la salud como la mitigación del riesgo de enfermedades cardiovasculares y ciertos tipos de cáncer, así como la protección contra enfermedades neurodegenerativas, como la enfermedad de Alzheimer y la enfermedad de Parkinson, y enfermedades inflamatorias, tal como la artritis reumatoide. Con el objeto de evaluar la actividad antioxidante de LD y AC en el presente trabajo se realizó estudios experimentales y computacionales. Se exploraron los mecanismos de transferencia de átomo de hidrógeno (HAT), de transferencia de un electrón seguida de transferencia de un protón (SET-PT) y de transferencia de un protón seguida de pérdida de un electrón (SPLET), empleando cálculos de la teoría del funcional de la densidad (B3LYP/6-311++G(d,p)), en fase gaseosa, agua, metanol y etanol, utilizando el programa Gaussian 09. Además, se realizó el ensayo de captación de radicales 1,1-difenil-2-picrilhidrazilo (DPPH•) usando como solvente etanol, expresado en concentración efectiva 50% (CE50). Finalmente, se analizó el mecanismo de reacción entre LD y AC con el radical DPPH•. La CE50 para el AC (2,13 ug/mL) fue menor que para la LD (4,43 ug/mL), indicando la mayor capacidad antioxidante del primero. SPLET fue el mecanismo termodinámicamente más favorable para ambos compuestos, en los tres solventes analizados. Para ambos compuestos, el OH en la posición para resultó ser el más propenso para la abstracción del H y formación del radical libre. El AC mostró mayor capacidad antioxidante que la LD en su forma zwitterion. Esto se atribuye a la mayor distribución de la densidad de espín sobre la estructura del AC en relación con la LD. Para la reacción entre el AC y la LD se encontró una estructura de transición. La energía de activación calculada para la reacción entre el AC y el DPPH• resultó ligeramente menor que para LD y DPPH•. Los resultados teóricos acuerdan con los experimentales contribuyendo a una mejor comprensión de la relación estructura-actividad antioxidante de los compuestos fenólicos.