



XXII Comunicaciones Científicas y Tecnológicas

Orden Poster: CE-062 (ID: 214)

Autor: Bentz, Erika Natalia

Título: Análisis conformacional de isómeros Z de (4 α ->6", 2 α ->O->1")-fenilflavano sustituido con R' = R = OH en vacío

Director:

Palabras clave: Reactividad, Flavonoides, DFT

Área de Beca: Cs. Naturales Y Exactas

Tipo Beca: Beca De Otro Organismo Cyt Desarrollados En La Unne

Periodo: 01/04/2015 al 01/04/2017

Lugar de trabajo: Facultad De Cs. Exactas Y Naturales Y Agrimensura

Proyecto: (13F008) Topología de la descomposición de la densidad electrónica y efectos de deslocalización electrónica, interacciones intramoleculares y reactividad.

Resumen:

Las procianidinas son polímeros altamente hidroxilados susceptibles de oxidación, razón por la cual la mayoría de las investigaciones se focalizan en sus propiedades antioxidantes. Muchos de los efectos beneficiosos de estos compuestos se atribuyen a estas características; resultando ser buenos captadores de Radicales Libres (RL), y consecuentemente, agentes protectores frente al estrés oxidativo y a los daños inducidos por los RL en membranas y ácidos nucleicos.

En este trabajo se presenta el estudio del espacio conformacional de (4 α ->6", 2 α ->O->1")-fenilflavano sustituido con R'=R=OH en fase gaseosa, constituyendo un nuevo paso en el estudio gradual que se viene llevando a cabo sobre estructuras similares y con distintos tipos de sustituciones.

Las geometrías optimizadas se obtienen empleando la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT) con el funcional híbrido B3LYP y el conjunto base 6-31G(d,p) de acuerdo a la implementación en el programa Gaussian 03.

El estudio conduce a cuarenta y ocho conformeros, verificando mediante análisis de frecuencias vibracionales que las estructuras corresponden a mínimos de energía. Se evalúan y analizan las variaciones en los parámetros geométricos y en las propiedades electrónicas debido a los cambios conformacionales.

Se aplica la teoría de Bader de Átomos en Moléculas (AIM) para evaluar y caracterizar interacciones intramoleculares, complementariamente con un análisis de los Orbitales Naturales de Enlaces (NBO) para cada conformero descripto, caracterizando interacciones hiperconjugativas que definen el orden de estabilidad y mecanismos de deslocalización de carga electrónica típicos este tipo de estructuras. Las propiedades topológicas son evaluadas empleando el programa PROAIM, utilizando funciones de onda calculadas al nivel B3LYP y el conjunto base 6-311++G(d,p) y el análisis NBO se realiza al mismo nivel.

El conocimiento del espacio conformacional en vacío corresponde al estudio teórico de moléculas aisladas, libres de cualquier tipo de interacción intermolecular, y es útil para la determinación de las propiedades intrínsecas del sistema; permitiendo además medir los efectos de la presencia de distintos solventes posteriormente.

El conocimiento adquirido será relevante para el modelado de diferentes mecanismos descriptos para la capacidad de compuestos antioxidantes de captar radicales libres.