



# XXIV SINAQO ROSARIO 2023

## LIBRO DE RESÚMENES



**Simposio  
Nacional de  
Química  
Orgánica**

@fotosderosario

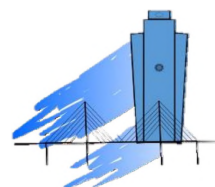


*XXIV SIMPOSIO NACIONAL DE QUÍMICA ORGÁNICA*  
*ROSARIO, SANTA FE, ARGENTINA, 2023*

<https://congresos.unr.edu.ar/sinaqo2023/>



**Sociedad Argentina de Investigación  
en Química Orgánica**



# Libro de Resúmenes del XXIV Simposio Nacional de Química Orgánica

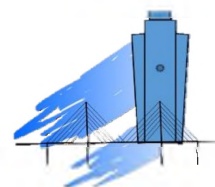
XXIV Simposio Nacional de Química Orgánica: Libro de Resúmenes  
Sociedad Argentina de Investigación en Química Orgánica (SAIQO)  
Rosario, Argentina, Noviembre de 2023

**Diseño, compilación, diagramación, compaginación y edición:**  
Pamela Forastieri, Agustina La Venia, Guillermo R. Labadie, Martín  
J. Riveira, Mario Salazar, Margarita Vallejos y María Marta Zanardi.

Título: XXIV Simposio Nacional de Química Orgánica: Libro de Resúmenes  
Editorial: Sociedad Argentina de Investigación en Química Orgánica (SAIQO)  
1a ed. - Rosario, 2023.  
Libro digital, PDF

Archivo Digital: descarga y online  
**ISBN 978-631-00-1621-4**

1. Química Orgánica. I. Título.  
CDD 547.0071







## MODELADO MOLECULAR DE LA EXTRACCIÓN DE POLIMETOXIFLAVONAS PRESENTES EN LA CÁSCARA DE MANDARINA

Carlos A. Galarza, Melisa J. Hidalgo, Roberto G. Pellerano y Darío J. R. Duarte.

Instituto de Química Básica y Aplicada del Nordeste Argentino, IQUIBA-NEA, Corrientes, Argentina. e-mail: [carlosgalarza333@gmail.com](mailto:carlosgalarza333@gmail.com)

Palabras claves: Polimetoxiflavonas, Modelado Molecular, Potencial Electrostático.

El cultivo de cítricos representa una de las actividades productivas más importantes en la provincia de Corrientes. La alta demanda de estas frutas está basada principalmente en su valor nutricional junto a su sabor y aroma característicos, entre otras cualidades. Estos cítricos también contienen compuestos orgánicos de gran relevancia debido a sus propiedades antioxidantes.<sup>1</sup> En el presente trabajo, se realizaron determinaciones espectrofluorométricas (DE), sobre extractos clorofórmicos de la cáscara de mandarina Murcott madura, producida en la provincia de Corrientes, y se realizó el modelado computacional del proceso de extracción.

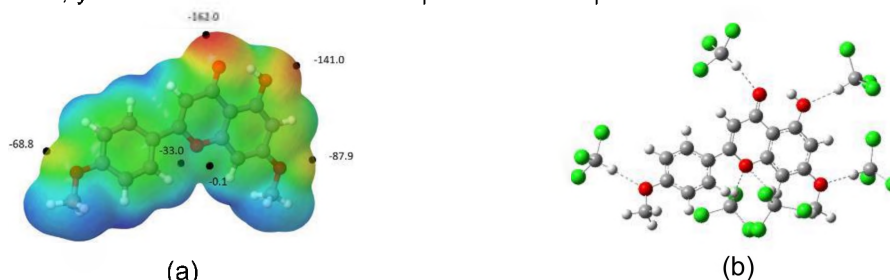


Figura 1: a) Mapa de potencial electrostático molecular de una PMF modelo (los valores en kJ/mol). b) Estructura molecular del complejo PMF...6Cloroformos.

Las DE muestran picos de fluorescencia a  $\lambda_{\text{Ex}}=370$  nm y  $\lambda_{\text{Em}}=540$  nm. Estos picos se corresponden con la presencia de polimetoxiflavonas (PMFs).<sup>1</sup> Estas moléculas son conocidas como componentes defensivos de las plantas contra patógenos. Los resultados obtenidos concuerdan con los encontrados en mandarina Satsuma cultivada en Japón. Las técnicas de modelado molecular explican adecuadamente el proceso químico de adsorción de las PMFs por parte del cloroformo. En la figura 1(a) se muestra el potencial electrostático molecular (PEM), en donde se observan 6 mínimos los cuales se corresponden con los enlaces de hidrógeno que se forman en el complejo molecular (figura 1b). De esta manera, el PEM predice adecuadamente los sitios de ataque electrofílico donde se forman los enlaces de hidrógeno que permitirán la extracción de las PMFs con el cloroformo.

### Referencias:

1. Muharfiya, D. F. R.; Saito, Y.; Itakura, K. I.; Kohno, T. S.; Suzuki, T. K.; Kondo, N. *Horticulturae* **2017**, 3, 1-11.